

Р. И. ДУБОВ

**КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
ГЕОХИМИЧЕСКИХ
ПОЛЕЙ
ДЛЯ ПОИСКОВ
РУДНЫХ
МЕСТОРОЖДЕНИЙ**

ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА» · СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ГЕОХИМИИ

550.4+550.8:519

Р. И. ДУБОВ

КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ
ДЛЯ ПОИСКОВ
РУДНЫХ
МЕСТОРОЖДЕНИЙ



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА» · СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
НОВОСИБИРСК · 1974



8401

Монография посвящена решению основных вопросов, возникающих при составлении и интерпретации геохимических карт, разрезов и других отображений геохимических полей математическими методами. Излагаются исследования статистических законов, теория ошибок наблюдений, методика изображения геохимических полей и выделения тех их особенностей, которые указывают на наличие рудных месторождений. Дается методика моделирования геохимических полей при задаваемых условиях (решения прямых задач), а также способы интерпретации практически наблюдаемых аномалий (решения обратных задач). Эти способы дают возможность количественно оценивать по геохимическим аномалиям параметры рудных тел и геохимических процессов.

Монография рассчитана на читателей, знакомых с теорией вероятностей, математической статистикой и другими разделами математики в объеме программы высшего технического учебного заведения. Примеры даются с детальностью, необходимой для понимания основных положений и использования этой работы производственниками. Основные положения работы, касающиеся методики исследований, применимы для изучения не только геохимических полей, но и в других отраслях науки, имеющих дело с измерениями и полями чисел.

ВВЕДЕНИЕ

Любое познание означает уточнение суждений об изучаемых явлениях, что на определенном этапе приводит к их количественным характеристикам. Тогда появляется возможность использования математического аппарата, который при правильном его применении является мощным средством извлечения полезной информации из имеющихся данных. К использованию этого аппарата переходит сейчас и геохимия, выводы которой до недавнего времени выражались преимущественно в феноменологическом описательном, неколичественном виде, несмотря на количественное выражение используемых результатов вещественного анализа геохимических проб.

Количественный анализ любых явлений природы, в том числе и геохимических, имеет основной своей целью решение так называемых обратных задач — оценку изучаемых процессов и объектов их воздействия по наблюдаемым результатам этого воздействия, искаженным помехами.

Известный математический аппарат решения обратных задач был развит рядом исследователей в применении к геофизике. Этот аппарат в принципе применим и к геохимии: значения концентраций химических элементов в сети точек изучаемого пространства образуют поле чисел, характеризующих определенные процессы и объекты в некотором смысле так же, как геофизические поля.

Тем не менее применение математического аппарата решения обратных задач в геохимии задержалось по сравнению с применением его в геофизике. Это было связано со специфическими трудностями, преодолению части которых и посвящена данная работа.

В частности, в геохимии исследователи столкнулись с большим влиянием ошибок измерений и локальных неоднородностей геохимических полей при существенном отклонении статистического распределения таких помех от нормального закона. Это затрудняло выделение полезных сигналов в изучаемых полях и потребовало проведения освещаемых ниже исследований по теории погрешностей. Специальные исследования понадобились для поиска математического выражения геохимических процессов, выявления таких функциональных связей и параметров, которые могут быть оценены при решении обратных задач геохимии. Существующий математический аппарат оказался недостаточным для этого, и возникла необходимость в разработках по теории моделирования.

Для решения обратных задач, вообще говоря, необходимо предварительное решение прямых задач — выяснение вопросов о том, что должно наблюдаться при воздействии различных процессов на определенные объекты.

Началом математических исследований, носящих характер решения прямых задач общей геохимии, можно считать, вероятно, появление статей Д. С. Коржинского (1947, 1949, и др.).

Первые количественные построения в поисковой геохимии сделаны А. П. Солововым (1952, 1959, и др.) для двух типов вторичных аномалий. Им была установлена приближенная пропорциональность между продуктивностями остаточных (элювиально-делювиальных) ореолов и выходов залегающих под ними рудных тел, а также между концентрациями рудообразующих элементов в аллювиальных потоках и суммарной продуктивностью ореолов на площади водосбора. Эти решения сыграли большую иницирующую роль в привлечении внимания исследователей к количественной оценке явлений, важных для поисковой геохимии.

Автором данной работы для некоторых условий была найдена возможность вычислять раздельно по наблюдениям остаточных ореолов оценки мощности рудных тел, их протяженности и концентрации в них рудообразующих элементов (Дубов, 1963₃, 1964₂, 1968₃). Удалось вскрыть также закономерности, пользуясь которыми можно находить количественные характеристики геохимических процессов по распределению вещества в коренных рудовмещающих породах (Дубов, 1963₁, 1963₂, 1963₅, 1964₁, 1966₂; Дубов, Найгебауэр, Соловьева, 1966; Соловов, 1966). При этом были установлены причины проявления некоторых часто встречающихся форм ореолов. Наконец, удалось разработать первые алгоритмы выделения полезных сигналов и интерпретации наблюдаемых полей с получением оценок распределения вещества в пространстве в виде функций заранее неизвестного вида (формы) (Дубов, 1968₃).

В данной работе подытоживаются результаты, полученные в этом направлении к настоящему времени автором и руководимым им коллективом. Здесь описываются:

1. Положения, необходимые для правильной оценки точности и возможностей применяемых в геохимии методов измерений, в частности решение спорного вопроса о возможности использования для количественных геохимических построений широко распространенного на производстве экспрессного («полуколичественного») спектрального анализа.

2. Методы оценки и изображения геохимических полей объективными способами, дающими возможность использовать современную вычислительную технику для извлечения полезной информации из быстро растущего количества данных, получаемых сейчас при геохимических съемках.

3. Математические выражения важных для практики геохимических аномалий, необходимые для их объективного выделения на изображениях наблюдаемых в природе геохимических полей.

4. Методы математического моделирования сложных геохимических процессов для решения вопросов, возникающих при исследованиях и интерпретации результатов полевых работ в еще не изученных условиях.

5. Приемы количественной интерпретации геохимических полей с помощью атласа теоретических кривых (палеток) и автоматических цифровых вычислительных машин (с учетом многообразия возможных форм операторов, описывающих формирование этих полей).

Для решения поставленных задач потребовалось предварительно рассмотреть ряд общих вопросов математической статистики, выполняющей в этой книге вспомогательную роль. Изложение таких вопросов (гл. I) может быть опущено при первом чтении теми, кто не интересуется тонкостями математического обоснования приводимых далее положений, непосредственно важных для геохимии. Некоторое самостоятельное значение для статистической обработки данных имеют освещенные здесь свойства четырехпараметрического логнормального распределения (g -распределения), а также связи между параметрами логнормального распределения величин и их логарифмов. Сравнительно большое внимание здесь уделено вопросам аппроксимации, служащей для

выделения максимальной полезной информации из результатов любых наблюдений.

Описываемые исследования проведены для решения вопросов, касающихся главным образом поисков рудных месторождений, с чем автор был связан более или менее тесно многие годы. Но найденные решения могут быть использованы и в других отраслях геохимии: во многих случаях для этого достаточно лишь сменить термин «рудное тело» на название другого геологического объекта. Принципиальное значение здесь имеют общие исследования геохимических полей.

В частности, представителям общей геохимии может быть интересно описание способов количественной оценки геохимической подвижности элементов по расстояниям, проходимым частицами (атомами, ионами и др.) при изучаемых процессах. До сих пор в литературе преобладают оценки лишь относительной подвижности: по расположению максимумов и отношениям концентраций делаются заключения о том, какой из элементов имеет большую или меньшую подвижность по сравнению с другими, без количественного ее определения. Далее будет показано, что эти распространенные заключения противоречивы.

В последние годы к решению прямых задач геохимии подключился ряд новых исследователей (Голубев, Гарибянц, 1968; Поликарпочкин, 1966; Путиков, 1969; и др.). Ими получены многочисленные результаты для различных конкретных условий. Однако, как отмечают и эти авторы, распространенные сейчас методы исследований недостаточны для решения задач, выдвигаемых практикой, и выбор задач производится исходя не столько из степени их важности, сколько из возможностей решения. Поэтому в данной работе основное внимание уделено не конкретным решениям, а методам, с помощью которых читатель сможет получить нужные ему решения при более широком круге условий, чем это было возможно ранее. Конкретные решения приведены здесь лишь для случаев, сравнительно часто встречающихся на практике и представляющихся автору удобными для иллюстрации развиваемых методов поиска решений. Так, описываемые ниже композиционное моделирование и ранговая аппроксимация иллюстрируются главным образом на остаточных элювиально-делювиальных ореолах, имеющих известное практическое значение; тремя наблюдаемыми на практике видами ограничено рассмотрение первичных ореолов. Но это, разумеется, не значит, что автор считает такие виды ореолов исключительными по распространенности и важности. Описанными способами читатель сможет получать решения в других, интересующих его случаях.

Кроме того, некоторые конкретные решения приведены для важных случаев, поддающихся распространенной методике моделирования, но не освещенных в литературе с той детальностью, которой удалось здесь достичь. Это касается, например, теории перераспределения вещества по фракциям в рыхлом покрове.

Поставленные цели обусловили стиль изложения. Используя математические методы, эта работа в то же время содержит положения, не принятые в «чистой» математике, но представляющиеся практически важными. Это не означает пренебрежения к строгой математике: она приносит с собой уменьшение риска ошибок. Но в то же время техника и естественные науки, имеющие дело со сложными природными явлениями, сталкиваются с необходимостью поиска хотя бы ориентировочных решений для актуальных задач практики. Иногда такие решения оправдываются уже тем, что привлекают внимание исследователей к уточнению их и развитию. Даже физика пользуется результатами экспериментов и не вполне строгих теоретических построений, уточняющихся со временем. Естественно, что такими положениями приходится пользоваться и геохимии. В некоторых случаях автору пришлось допустить не вполне строгие с точки зрения «чистой» математики, но при-

нятые в прикладных науках обоснования также для краткости и наглядности. Целесообразность положений такого рода отмечалась многими учеными. Так, в предисловии к книге (Гаусс, 1957) Г. В. Баградуни справедливо отмечает, что широкое распространение способа наименьших квадратов в значительной мере связано с наглядностью примененных Гауссом обоснований, хотя с точки зрения современной «чистой» математики эти обоснования не вполне строги.

Полагая известной физическую сущность некоторых явлений, автор опускал указания на вытекающие из нее свойства используемых функций (непрерывность, дифференцируемость и т. д.): там, где это не требует особых пояснений, функции предполагаются «хорошими», подчиняющимися тем требованиям, которые необходимы для производимых над ними операций. По той же причине иногда краевые условия задач приводятся в виде геологических характеристик.

В случаях, когда это не грозит путаницей, мы для удобства одинаково обозначаем область физического пространства и ее объем, случайную величину и ее значение, статистические параметры и их оценки (например, среднее квадратическое и стандартное отклонения объединяются одним первым названием). Координаты всюду предполагаются прямоугольными.

Для поставленных целей пришлось использовать опыт, а с ним и различную терминологию поисковой геохимии, разных разделов математики, физики и геофизики. Поэтому для каждого из представителей этих наук в отдельности часть применяемых здесь терминов может показаться непривычной.

При современном объеме научной информации по названным наукам невозможно полное ознакомление с нею одного лица. Поэтому в книге возможны повторения или упущения некоторых решений, найденных в других отраслях.

При исследованиях на стыке наук, каждая из которых достаточно сложна, особенно трудно ожидать полного отсутствия спорных решений и ошибок. Но такие исследования сейчас необходимы, и автор надеется, что эта книга будет полезной, хотя некоторые ее выводы со временем, вероятно, будут изменены. Применимость основных описываемых здесь положений проверена на практических материалах геохимических работ, проводившихся в Казахстане и Забайкалье, и отчасти иллюстрируется на примерах.

Автор выражает признательность руководству Института геохимии СО АН СССР за поддержку исследований, коллективу сотрудников за помощь в оформлении рукописи, а также всем специалистам, принимавшим участие в обсуждении рассматриваемых здесь положений и в их проверке в лабораториях и на производстве.

Автор с благодарностью примет все замечания и предложения. Просьба направлять их по адресу: 664033, Иркутск-33, Институт геохимии.

**СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ
И ИЗОБРАЖЕНИЕ
ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ**

Глава I

АППРОКСИМАЦИЯ ЗАКОНОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Данная глава содержит в основном вспомогательный материал, необходимый для других разделов. Читатель, не интересующийся математическими обоснованиями, может опустить выводы формул, ознакомившись с вводимыми обозначениями и полученными результатами.

§ 1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

В дальнейшем весьма часто имеется необходимость в выражениях «концентрация интересующего нас вещества», «концентрация вещества, распределение которого изучается» и т. п. Для краткости они будут заменяться либо одним словом «концентрация», либо сочетанием «концентрация μ » (под μ понимается обобщенное обозначение такого вещества — элемента или химического соединения, минерала и т. д.).

Произвольную изучаемую величину обозначим ξ , а ее оценку, получаемую при наблюдениях (результат измерений, содержащий некоторую ошибку, или результат воздействия на ξ какого-либо процесса), обозначим x .

Любые значения x , наблюдаемые при геохимических исследованиях, можно рассматривать как результат воздействия на ξ некоторой совокупности случайных факторов $F = \{F_i\}$ ($i = 1, 2, \dots, L$). В частности, во время измерений концентраций любого интересующего нас вещества μ неизбежно действуют неполностью учитываемые факторы, приводящие к случайным ошибкам. Истинные концентрации μ в пробах, в свою очередь, являются результатом воздействия неполностью учитываемых (т. е. случайных по отношению к наблюдателю) природных процессов на изучаемый объект.

Все изучаемые объекты не являются идеальными замкнутыми системами, и на них, строго говоря, действуют в какой-то мере процессы, протекающие в неограниченном пространстве. Поэтому точное математическое описание действия $\{F_i\}$ на ξ возможно только с применением операторов неограниченной сложности с бесконечным числом параметров. Это должно приводить к законам статистического распределения значений x , описываемым функциями с бесконечным числом параметров. Применяемые же на практике функции с конечным числом параметров могут рассматриваться лишь как аппроксимирующие действительные природные распределения при определенных упрощениях в представлениях об F .

Иными словами, описание действительного распределения неизбежно заменяется описанием какой-либо из статистических моделей конечной сложности. В следующем параграфе мы рассмотрим особо те из них, которые оказались эффективными при описываемых ниже исследованиях.

Обозначим через x'_{i-1} значение изменяемой величины, которое она приобрела к моменту действия i -го фактора, а через x'_i — значение этой

величины, приобретаемое ею в результате действия i -го фактора; $x'_0 = \xi$ — начальное значение; $x'_L = x$ — результат действия всей совокупности F на ξ . Операторы, отображающие изменения, вносимые F_i , будем обозначать так же:

$$x'_i = F_i(x'_{i-1}), \quad x = \left(\prod_{i=1}^L F_i \right) (\xi) = F(\xi).$$

Далее всюду, иногда без оговорок, будем предполагать, что операторы F_i , относящиеся к одной совокупности F , имеют один тип (выражаются одинаковыми формулами) со случайными, непредсказуемыми при разных реализациях значениями параметров*. Как будет показано, в определенных случаях распределение значений x может быть предсказано при знании лишь типа F_i и весьма общих статистических характеристик параметров без знания законов их распределения, которые могут быть различными в одной совокупности F . Будем также полагать, что при фиксированных значениях параметров каждый из операторов F_i осуществляет взаимно-однозначное отображение x'_{i-1} в x'_i .

Каждую из моделей будем считать системой «без памяти и предвидения», т. е. параметры в F_i не зависят от ξ и от параметров в F_j как при $i > j$, так и при $i < j$. Для этого необходимо и достаточно отсутствие взаимной зависимости между F_i и x'_{i-1} для всех i , т. е. отсутствие взаимной зависимости параметров и формулы оператора от его аргумента; результат же действия этого оператора на аргумент может зависеть от последнего.

Действительно, отсутствие «памяти и предвидения» означает отсутствие взаимной зависимости между параметрами в F_i и величиной x'_{i-1} . Но $x'_{i-1} = F_{i-1}(x'_{i-2})$, где аналогично F_{i-1} не зависит от x'_{i-2} . Следовательно, при отсутствии взаимной зависимости между F_i и x'_{i-1} отсутствует взаимная зависимость между F_i , F_{i-1} , x'_{i-2} . Проводя такое рассуждение для $i=L, L-1, \dots, 1$, получаем: если отсутствует взаимная зависимость между F_i и x'_{i-1} для всех i , то отсутствует также взаимная зависимость между F_i, F_j, x'_k для всех неравных i, j, k , а следовательно, и зависимость F_i от ξ при любом $i=1, 2, \dots, L$. Таким образом, при оговоренных условиях все операторы в F взаимно независимы. В свою очередь, взаимная независимость операторов означает независимость F_i от действия F_{i-1} , т. е. от величины x'_{i-1} для всех i , кроме, может быть, $i=1: x'_0 = \xi$ не есть результат действия какого-либо оператора из F , и независимость F_1 от ξ не обязательна для независимости операторов. Однако зависимость F_1 от аргумента при отсутствии такой зависимости у остальных операторов противоречит обусловленной однотипности операторов в F . Следовательно, при поставленном условии для независимости F_i от x'_{i-1} при всех возможных i необходима и достаточна взаимная независимость факторов (или операторов), входящих в F . Поэтому далее мы будем говорить либо о независимости F_i от x'_{i-1} , либо о взаимной независимости факторов (операторов) F_i , имея в виду равнозначность этих высказываний.

При соблюдении ограничений, наложенных на F , результат действия любого фактора F_i зависит только от того состояния объекта, кото-

* Условие однотипности операторов F_i обычно для современной теории вероятностей. Например, широко применяемое нормальное распределение получается при представлении каждого из операторов F_i как оператора суммирования величины x'_{i-1} со случайной величиной $\Delta x'_i$, которая может рассматриваться в качестве параметра для F_i . Логнормальное распределение, как будет показано ниже, получается при представлении F_i как операторов умножения.

рое он принимает к моменту этого действия (что выполняется для многих природных процессов и отражается так называемой простой цепью Маркова). Например, действие F_i может выражаться в прибавлении положительной или отрицательной случайной величины Δx_i (являющейся в этом случае параметром оператора F_i) к x_{i-1} , в результате чего значение $x_i = x_{i-1} + \Delta x_i$ зависит только от Δx_i и x_{i-1} , но не зависит от того, какими были $x_{i-2}, x_{i-3}, \dots, x_0$. Можно представить совокупность факторов F , действие каждого из которых выражается в умножении x_{i-1} на некоторую случайную величину δ_i , и т. п.

Описание многих процессов, где различные факторы в действительности зависимы, может быть сделано с объединением их в системы, рассматриваемые как новые, приближенно независимые факторы. Так, например, сила электрического тока в цепи электрической дуги при спектральном анализе пробы может отличаться лишь на малую величину от силы тока в другой близкий момент. Средние же отклонения от заданной силы тока, вычисляемые для значительных смежных отрезков времени, могут рассматриваться как независимые величины (соответственно радиусу корреляции во времени).

Зависимость наблюдаемого статистического распределения от изучаемого и от совокупности случайных факторов. Обычно геохимику приходится судить об изучаемых статистических распределениях величин ξ по наблюдаемым значениям $x = \xi + \Delta x$, где Δx — случайные величины, являющиеся результатом действия совокупности не полностью известных (случайных) факторов F . Поэтому плотность вероятности значения x , обозначаемая далее $p(x)$, отличается от плотности вероятности равного ему значения ξ , т. е. от $p(\xi)$. Это отличие зависит от соотношения $\sigma^2(\xi) = D(\xi)$ (дисперсии значений ξ) и $\sigma^2(\Delta x) = D(\Delta x)$ (дисперсии значений Δx), или, что эквивалентно, от соотношения $\sigma(\xi)$ и $\sigma(\Delta x)$ — соответствующих средних квадратических отклонений, используемых обычно в качестве параметров функций $p(\xi)$ и $p(\Delta x)$.

Рассмотрим, как будет меняться $p(x)$ при изменении отношения $\sigma(\Delta x)/\sigma(\xi)$ или $\sigma(\xi)/\sigma(\Delta x)$.

Пусть $\sigma(\Delta x)/\sigma(\xi) \rightarrow 0$ при фиксированном значении $\sigma(\xi)$. Тогда $\sigma(\Delta x) \rightarrow 0$. Если при этом $M(\Delta x) = 0$, т. е. систематическое отклонение отсутствует, то, очевидно, $x \rightarrow \xi$. Тогда функция $p(x)$ распределения значений x совпадает с функцией $p(\xi)$ распределения значений ξ . Если же $M(\Delta x) \neq 0$, то $p(x)$ сдвигается относительно ξ на фиксированную величину $M(\Delta x) = \Delta_c$, т. е. в данном случае

$$p(x) \rightarrow p(\xi + \Delta_c); \quad p(x)/p(\xi + \Delta_c) \rightarrow 1.$$

Если же $\sigma(\xi)/\sigma(\Delta x) \rightarrow 0$ при фиксированном значении $\sigma(\Delta x)$, то $\sigma(\xi) \rightarrow 0$, т. е. тогда можно считать с любой наперед заданной точностью, что F действует на совпадающие значения $\xi = \xi_c$, где $\xi_c = \text{const}$. Но тогда $p(x)$ есть распределение значений Δx относительно этого значения ξ , т. е. в данном случае

$$p(x) \rightarrow p(\Delta x + \xi_c); \quad p(x)/p(\Delta x + \xi_c) \rightarrow 1.$$

Нетрудно видеть, что полученные выражения относительной сходимости для $p(x)$ справедливы и в случае, когда рассматриваемые отношения величин $\sigma(\Delta x)$ и $\sigma(\xi)$ стремятся к нулю за счет не уменьшения числителей, а увеличения знаменателей, при фиксированных числителях, т. е. вообще:

$$\text{если } \sigma(\Delta x)/\sigma(\xi) \rightarrow 0, \text{ то } p(x)/p(\xi + \Delta_c) \rightarrow 1;$$

$$\text{если } \sigma(\xi)/\sigma(\Delta x) \rightarrow 0, \text{ то } p(x)/p(\Delta x + \xi_c) \rightarrow 1.$$

Эти выражения означают, что при малой относительной роли той составляющей дисперсии изучаемой величины, которая обусловлена со-

вокупностью случайных факторов F , фиксируемое статистическое распределение наблюдаемых результатов хорошо отражает форму того (исходного) распределения, на которое воздействует F , но может быть сдвинуто на величину Δ_c . При большой же относительной роли этой составляющей или малой относительной величине дисперсии значений ξ форма фиксируемого распределения определяется совокупностью F .

Этот вывод почти тривиален, но, к сожалению, до сих пор не учитывается при многих геохимических исследованиях: распределение результатов измерений концентраций химических элементов в горных породах обычно принимается в качестве непосредственного отображения распределения изучаемых величин. Между тем, в действительности, в случаях относительно малой дисперсии изучаемых величин фиксируемое распределение в большей степени отражает распределение ошибок измерений, которое для правильных выводов должно быть исключено. Способы такого исключения будут рассмотрены далее.

Зависимость статистического распределения значений функций от распределения аргумента. Одни и те же объекты могут характеризоваться различными измеряемыми величинами, имеющими разные законы статистического распределения. Так, набор шаров из одного материала может характеризоваться либо значениями их веса, либо диаметрами. Поскольку вес пропорционален третьей степени диаметра, то статистическое распределение значений веса существенно отличается от распределения диаметров. При геохимических исследованиях бывает необходимо изучать соответствие между статистическими распределениями различных функций концентраций. Формулы связи между распределениями случайных величин и их дифференцируемых функций известны (Пугачев, 1962). Однако мы дадим относительно простой вывод такой формулы в нужном для нас общем виде для случаев произвольной размерности (n) пространств аргументов и значений функций.

Пусть n — произвольное натуральное число, $x = (X_1, X_2, X_3, \dots, X_n) = \{X_i\}$, $i=1, 2, \dots, n$ (или $x = \{X_i\}_{i=1}^n$) и $y = (Y_1, Y_2, Y_3, \dots, Y_n) = \{Y_i\}$, $i=1, 2, \dots, n$ (или $Y = \{Y_i\}_{i=1}^n$) — точки в n -мерных евклидовых пространствах, причем точка y является образом точки x .

Отображение x в y зададим системой строго монотонных (строго возрастающих или строго убывающих) функций $\{\omega_i\}$ ($i=1, 2, \dots, n$): $Y_i = \omega_i(X_i)$.

Введем обозначения: $P(x \in \Delta V_x)$ — вероятность появления значений x в области объемом ΔV_x , ограниченной координатами $\{X_i\}$ и $\{X_i + \Delta X_i\}$, $i=1, 2, \dots, n$; $P(y \in \Delta V_y)$ — вероятность появления значений y в области объемом ΔV_y , ограниченной координатами $\{Y_i\}$ и $\{Y_i + \Delta Y_i\}$, $i=1, 2, \dots, n$, причем $Y_i = \omega_i(X_i)$, $Y_i + \Delta Y_i = \omega_i(X_i + \Delta X_i)$, $\Delta V_x = \prod_{i=1}^n |\Delta X_i|$, $\Delta V_y = \prod_{i=1}^n |\Delta Y_i| = \prod_{i=1}^n |\omega_i(X_i + \Delta X_i) - \omega_i(X_i)|$.

В связи с последним условием $P(x \in \Delta V_x) = P(y \in \Delta V_y)$. Деля обе части этого равенства на ΔV_x и умножая правую часть на $\Delta V_y / \Delta V_x = 1$, получаем:

$$\frac{P(x \in \Delta V_x)}{\Delta V_x} = \frac{P(y \in \Delta V_y)}{\Delta V_y} \cdot \frac{\Delta V_y}{\Delta V_x}. \quad (1)$$

Перейдем к пределам:

$$\lim_{\Delta V_x \rightarrow 0} \frac{P(x \in \Delta V_x)}{\Delta V_x} = p(x) = p\{X_i\} \text{ — плотность вероятности появления } x = \{X_i\} \quad (i=1, 2, \dots, n);$$

$$\lim_{\Delta V_y \rightarrow 0} \frac{P(y \in \Delta V_y)}{\Delta V_y} = p(y) = p\{\omega_i(X_i)\} \text{ — плотность вероятности появления } y = \{Y_i\} = \{\omega_i(X_i)\};$$

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta V_x \rightarrow 0} \frac{\Delta V_y}{\Delta V_x} &= \lim_{\{\Delta X_i \rightarrow 0\}} \frac{\prod_{i=1}^n |\omega_i(X_i + \Delta X_i) - \omega_i(X_i)|}{\prod_{i=1}^n |\Delta X_i|} = \\ &= \lim_{\{\Delta X_i \rightarrow 0\}} \frac{\prod_{i=1}^n \left| \frac{\partial \omega_i(X_i)}{\partial X_i} \cdot \Delta X_i \right|}{\prod_{i=1}^n |\Delta X_i|} = \prod_{i=1}^n \left| \frac{\partial \omega_i(X_i)}{\partial X_i} \right|. \end{aligned}$$

Используя эти равенства, получаем из (1):

$$p\{X_i\} = p\{\omega_i(X_i)\} \cdot \prod_{i=1}^n \left| \frac{\partial \omega_i(X_i)}{\partial X_i} \right|; \quad p\{\omega_i(X_i)\} = \frac{p\{X_i\}}{\prod_{i=1}^n \left| \frac{\partial \omega_i(X_i)}{\partial X_i} \right|}. \quad (2)$$

Далее мы будем часто пользоваться также следующим очевидным свойством медианных значений одномерных величин: если $\omega(x)$ — строго монотонная функция и если $x_{\text{ме}}$ — медианное значение x , то $P(x < x_{\text{ме}}) = P(\omega(x) < \omega(x_{\text{ме}})) = 1/2$. То есть если $x_{\text{ме}}$ есть медианное значение для x , то значение $\omega(x_{\text{ме}})$ равно $(\omega(x))_{\text{ме}}$ — медианному значению для $\omega(x)$. И наоборот: если $(\omega(x))_{\text{ме}}$ есть медианное значение для $\omega(x)$, то $x_{\text{ме}} = \omega^{-1}((\omega(x))_{\text{ме}})$, где ω^{-1} — функция, обратная функции ω . В случаях, когда распределение значений $\omega(x)$ симметрично, имеем, по определению: $(\omega(x))_{\text{ме}} = M(\omega(x))$, где M — оператор математического ожидания. То есть тогда $x_{\text{ме}} = \omega^{-1}(M(\omega(x)))$. В таких случаях функцию ω будем называть симметризирующей. Для удобства введем для симметризирующей функции особое обозначение u и перепишем последнее равенство с этим обозначением:

$$x_{\text{ме}} = \omega^{-1}(M(u(x))). \quad (3)$$

§ 2. СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

В геохимии широко используются некоторые статистические законы, особенно нормальный и логнормальный. Для правильного их применения и толкования получаемых результатов необходимо знать, каким образом возникают соответствующие им распределения. Этой цели служат описываемые ниже модели. Они не являются единственно возможными, но удобны для иллюстрации метода исследований и последующих вспомогательных построений. По аналогии могут быть созданы и другие модели.

Обозначая $\Delta x'_i = x'_i - x'_{i-1}$ и $\Delta x = x - \xi$, всегда можно записать:

$$\left. \begin{aligned} x &= \xi + \Delta x = \xi + \sum_{i=1}^L \Delta x'_i, \\ \Delta x &= \sum_{i=1}^L \Delta x'_i. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где

Рассмотрим распределение этих величин при разных формах F_i — при трех нужных нам статистических моделях.

Нормальное распределение

Предположим, что соблюдаются следующие условия: 1) $\Delta x'_i$ и x'_{i-1} взаимно независимы при всех возможных i ; 2) для любого i $|\Delta x'_i| \ll$

$\ll \sum_{j=1}^{i-1} |\Delta x'_j| + \sum_{j=i+1}^L |\Delta x'_j|$, т. е. абсолютная величина изменения, производимого каждым из факторов в отдельности, мала по сравнению с суммой абсолютных величин изменений, производимых всеми остальными факторами.

Первое условие означает, что $\Delta x'_i$ зависят только от факторов F_i , причем F_i не зависят от x_{i-1} . Тогда все F_i , согласно § 1, взаимно независимы, т. е. в данном случае взаимно независимы все $\Delta x'_i$.

Если с увеличением L оказывается $\frac{D(\Delta x'_i)}{D(\Delta x)} \rightarrow 0$, то это означает соблюдение требований центральной (классической) предельной теоремы Ляпунова, согласно которой распределение Δx сходится к нормальному в том смысле, в каком это обычно понимается (Гнеденко, 1965, и др.):

$$p(\Delta x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma(\Delta x)} \cdot \exp\left(-\frac{(\Delta x - M(\Delta x))^2}{2(\sigma(\Delta x))^2}\right), \quad (2)$$

где $\sigma(\Delta x) = \sqrt{D(\Delta x)}$ — среднее квадратическое значение Δx ; $D(\Delta x)$ — дисперсия этой величины. Важным свойством нормального распределения, связанным с его симметричностью, является, как известно, равенство медианного значения и математического ожидания: $\Delta x_{\text{ме}} = M(\Delta x)$.

Заметим для дальнейшего, что параметры этого распределения не зависят от ξ , а определяются лишь совокупностью F , ее характеристиками, в частности

$$K(\sigma(\Delta x), \xi) = 0, \quad (2a)$$

где K — оператор корреляционного момента.

При фиксированном значении ξ плотность вероятности значения x равна плотности вероятности соответствующего значения Δx , т. е. распределение (2) есть одновременно распределение x относительно ξ :

$$\left. \begin{aligned} \text{или} \quad p(x) &= p(\Delta x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma(\Delta x)} \cdot \exp\left(-\frac{(x - \xi - M(\Delta x))^2}{2(\sigma(\Delta x))^2}\right) \\ p(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma(x)} \cdot \exp\left(-\frac{(x - M(x))^2}{2(\sigma(x))^2}\right) \end{aligned} \right\}, \quad (3)$$

где $\sigma(\Delta x) = \sigma(x)$, $M(\Delta x) = M(x - \xi) = M(x) - \xi$. Формулы (2) и (3) как выражение нормального (гауссовского) закона записываются обычно в предположении $M(\Delta x) = 0$. Мы не делаем этого предположения в связи с рассматриваемыми далее возможными систематическими смещениями и ошибками. Нетрудно видеть, что форма кривой $p(x)$ не зависит от величины $M(\Delta x)$, которая выражается лишь в смещении моды распределения величины x относительно ξ .

Если величина ξ переменна и распределена по какому-то закону с плотностью вероятности $p(\xi)$, то в связи с равенством $x = \xi + \Delta x$ и независимостью Δx от ξ , распределение величины x есть композиция независимых распределений ξ и $\Delta x = x - \xi$. Согласно известной общей формуле композиции независимых распределений, при выполнении закона (2) имеем:

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma(\Delta x)} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} p(\xi) \cdot \exp\left(-\frac{(x - \xi - M(\Delta x))^2}{2(\sigma(x))^2}\right) \cdot d\xi \quad (4)$$

(здесь уже $\sigma(x) \neq \sigma(\Delta x)$, так как $\sigma(x)$ зависит и от $\sigma(\xi) \neq 0$).

Согласно сказанному в § 1, при малой величине $\sigma(\xi)/\sigma(\Delta x)$ выражение (4) должно сходиться к выражению вида (2), т. е. при относительно больших изменениях, вносимых совокупностью F (например,

приближенно нормально распределенными ошибками), распределение (4) наблюдаемых значений x становится неотличимым от нормального при любом действительном распределении значений ξ .

Из числа известных, нужных далее свойств нормального распределения напомним, что при $M(\Delta x) = 0$

$$M(|\Delta x|) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \sigma \approx 0,8\sigma; \quad E = 0,675\sigma, \quad (5)$$

где E — вероятное отклонение x от ξ (вероятность попадания Δx в интервал $(-E, E)$ равна $1/2$).

Формулы (2) и (3) дают отличную от нуля плотность вероятности для сколь угодно больших и малых (отрицательных) значений x из интервала $(-\infty, \infty)$. Сходимость же фактического распределения $p^*(\Delta x)$ (или $p^*(x)$) к нормальному $p(\Delta x)$ (или $p(x)$) в использованном выше смысле означает лишь, что при $m \rightarrow \infty$ в указанных условиях для любого фиксированного значения $\varepsilon > 0$ справедливо неравенство $|p^*(\Delta x) - p(\Delta x)| < \varepsilon$ при любом возможном Δx . Это требование может соблюдаться и при $p^*(\Delta x) = 0$ в области, где $|\Delta x - M(\Delta x)| \gg \sigma$. Поэтому при некоторых условиях отмечается непротиворечивость нормального распределения наблюдаемому в случаях, когда физически нормальное распределение невозможно. В частности, концентрации не могут быть отрицательными и больше 100%, т. е. по физическим требованиям изучаемые в геохимии распределения химических элементов не могут быть нормальными. По значениям же $p^*(\Delta x)$ и $p(\Delta x)$ для некоторой области значений Δx эти распределения могут быть близки.

В части литературы к упомянутому условию $\frac{D(\Delta x'_i)}{D(\Delta x)} \rightarrow 0$ для сходимости $p^*(\Delta x)$ к нормальному распределению добавляется условие $D\left(\sum_{i=1}^m \Delta x'_i\right) = D(\Delta x) \rightarrow \infty$ (Хальд, 1956, и др.). Тогда с увеличением m распределение $p^*(\Delta x)$ стремится к нормальному и в отношении увеличения области, где при фиксированном σ оказывается $p^*(\Delta x) > 0$.

Таким образом, строго нормальное распределение Δx достигается лишь при $D(\Delta x) \rightarrow \infty$, что означает $\sigma \rightarrow \infty$. Но тогда $p(\Delta x)$, $p(x) \rightarrow 0$ для всех Δx и x . Такой случай, очевидно, не представляет практического интереса. Поэтому формулами нормального распределения можно пользоваться только как приближенно описывающими фактическое распределение величин Δx и x , удовлетворяющих условиям (1) и (2). Такое фактическое распределение можно считать симметричным асимптотически-нормальным, но для краткости мы будем иногда называть его нормальным.

Заметим, что для этого распределения в связи с ограниченностью Δx (поскольку не бесконечны L и $\Delta x'_i$) отношение среднего квадратического отклонения к среднему абсолютному ($\sigma/M(|\Delta x|)$) меньше получаемого из выражения (5), так как σ определяется через квадраты отклонений и поэтому сильнее зависит от больших $|\Delta x|$, чем $M(|\Delta x|)$. Это следует иметь в виду при оценке согласия фактического распределения с асимптотически-нормальным.

При рассматриваемом симметричном асимптотически-нормальном распределении значений Δx относительно несложно решение обратной статистической задачи — оценка параметров распределения исходных значений ξ в случаях, когда известны распределение x и параметры распределения Δx .

Действительно, поскольку $x = \xi + \Delta x$, то при любом распределении ξ имеем:

$$M(\xi) = M(x) - M(\Delta x). \quad (6)$$

$$\text{Если же } M(\Delta x) = 0, \text{ то } M(\xi) = M(x). \quad (6a)$$

Согласно свойству дисперсии суммы независимых случайных величин $D(x) = D(\xi) + D(\Delta x)$, т. е.

$$D(\xi) = D(x) - D(\Delta x)^* \quad (7)$$

Несложно найти и корреляционные характеристики. Как известно (Хальд, 1956), если ошибки измерений случайны и распределены нормально, то корреляционный момент величин x и y , получаемых в результате измерений величин ξ и η , является несмещенной оценкой корреляционного момента измеряемых величин. Это положение, как нетрудно видеть, справедливо и для общего случая, когда x и y — результаты действия произвольной совокупности F на величины ξ и η , если распределение Δx асимптотически-нормально. В связи с важностью этого вывода мы приведем его обобщенное доказательство.

Пусть $x = \xi + \Delta x$, $y = \eta + \Delta y$, причем Δx и Δy распределены по симметричному асимптотически-нормальному закону.

Тогда по определению корреляционного момента:

$$\begin{aligned} K(\xi, \eta) &= M((\xi - M(\xi)) \cdot (\eta - M(\eta))) = M((x - \Delta x - M(x) + M(\Delta x)) \times \\ &\times (y - \Delta y - M(y) + M(\Delta y))) = M((x - M(x)) \cdot (y - M(y))) - M((\Delta x - \\ &- M(\Delta x)) \cdot (y - M(y))) - M((x - M(x)) \cdot (\Delta y - M(\Delta y))) + M((\Delta x - \\ &- M(\Delta x)) \cdot (\Delta y - M(\Delta y))). \end{aligned} \quad (8)$$

Согласно сказанному выше, величины Δx и Δy не коррелированы с ξ и η , а также и между собой. Тогда величина Δx не коррелирована с y , а Δy — с x . В таком случае последние три слагаемых в выражении (8) равны нулю как математические ожидания произведений некоррелированных центрированных величин, т. е.

$$K(\xi, \eta) = M((x - M(x)) \cdot (y - M(y))) = K(x, y). \quad (9)$$

Для удобства ссылок при дальнейшем использовании сформулируем полученный результат в виде следующего положения:

II. 1. Если величины Δx и Δy распределены по симметричным (асимптотически-нормальным) законам, то $K(x, y) = K(\xi, \eta)$.

Отсюда, учитывая правило (7), находим несмещенную оценку коэффициента корреляции величин ξ и η по значениям x и y :

$$r(\xi, \eta) = \frac{K(\xi, \eta)}{\sqrt{D(\xi) \cdot D(\eta)}} = \frac{K(x, y)}{\sqrt{(D(x) - D(\Delta x)) \cdot (D(y) - D(\Delta y))}}. \quad (10)$$

Зная парную корреляцию, можно по известным формулам перейти и к другим видам корреляции (Езекиэл и Фокс, 1966; Лукомский, 1961).

Логнормальное распределение

Пусть действие каждого (i -го) фактора из F выражается в умножении x'_{i-1} на δ_i , причем $\delta_i > 0$ для всех i . Тогда

$$x'_i = x'_{i-1} \cdot \delta_i, \quad x = \xi \cdot \prod_{i=1}^L \delta_i. \quad (11)$$

Обозначим $\delta_i = a_i$ для случая $\delta_i \geq 1$ и $\delta_i = 1/a_i$ для случая $\delta_i < 1$, т. е. всегда $a_i \geq 1$.

Предположим, что соблюдаются следующие условия: 1) δ_i и x'_{i-1} взаимно независимы при всех возможных i ; 2) для любого i справедли-

* Заметим, что согласно известной теореме о дисперсии $D(-\Delta x) = D(\Delta x)$. Поскольку $\xi = x - \Delta x$, то при недоучете зависимости x от величины Δx , стоящей по ту же сторону от знака равенства, может быть сделан ошибочный вывод $D(\xi) = D(x) + D(\Delta x)$, противоречащий равенству (7).

во неравенство $a_i \ll \prod_{j=1}^{i-1} a_j \cdot \prod_{j=i+1}^L a_j$. Предположим также, что $\xi > 0$ (если $\xi < 0$, то все дальнейшее справедливо для $(-x)$).

Заметим, что абсолютное значение изменения величины x , которое было бы вызвано воздействием любого из F_i непосредственно на ξ (что соответствует в данном случае умножению ξ на δ_i), при соблюдении условия 2, согласно равенству (11), мало по сравнению с суммой аналогичных изменений, которые были бы вызваны действием остальных факторов. Действительное же влияние F_i на x выражается в умножении величины $\xi \cdot \prod_{j=1}^{i-1} \delta_j \cdot \prod_{j=i+1}^L \delta_j$ на δ_j ; это влияние может быть относительно большим.

Согласно (11),

$$\left. \begin{aligned} \lg x'_i &= \lg x'_{i-1} + \lg \delta_i, & \Delta \lg x'_i &= \lg x'_i - \lg x'_{i-1} = \lg \delta_i \\ \lg x &= \lg \xi + \sum_{i=1}^L \Delta \lg x'_i = \lg \xi + \sum_{i=1}^L \lg \delta_i, & \Delta \lg x &= \lg x - \lg \xi = \sum_{i=1}^L \lg \delta_i. \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Выражения (12) отличаются от выражений (1) только обозначениями: вместо x , ξ , Δx_i здесь соответственно величины $\lg x$, $\lg \xi$, $\lg \delta_i = \Delta \lg x'_i$, причем, согласно поставленным условиям, эти величины удовлетворяют требованиям 1 и 2 предыдущего раздела. Следовательно, относительно величины $\Delta \lg x$ справедливо то, что говорилось относительно Δx в предыдущем разделе: если $\frac{D(\Delta \lg x'_i)}{D(\Delta \lg x)} \rightarrow 0$, то эта величина распределена по симметричному асимптотически-нормальному закону. Тогда при $D(\Delta \lg x) \rightarrow \infty$ можно написать:

$$p(\Delta \lg x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_l} \cdot \exp\left(-\frac{(\Delta \lg x - M(\Delta \lg x))^2}{2\sigma_l^2}\right), \quad (13)$$

где $\sigma_l = \sigma(\Delta \lg x)$ — среднее квадратическое отклонение значений $\Delta \lg x$ от $M(\Delta \lg x)$.

Аналогично формулам (3) при фиксированном ξ можно написать:

$$\left. \begin{aligned} p(\lg x) &= p(\Delta \lg x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_l} \cdot \exp\left(-\frac{(\lg x - \lg \xi - M(\Delta \lg x))^2}{2\sigma_l^2}\right), \\ \text{или} & \\ p(\lg x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_l} \cdot \exp\left(-\frac{(\lg x - M(\lg x))^2}{2\sigma_l^2}\right)^* \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Полагая в формуле (2, § 1) $n=1$, $\omega_i(X_i) = \lg x$ и учитывая, что $\frac{\partial(\lg x)}{\partial x} = \frac{\partial(\lg e \cdot \ln x)}{\partial x} = \frac{\lg e}{x}$ (где e — основание натуральных логарифмов), получим, как известно, выражение закона логарифмически-нормального (логнормального) распределения величины x :

$$\left. \begin{aligned} p(x) &= \frac{\lg e}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_l \cdot x} \cdot \exp\left(-\frac{(\lg x - \lg \xi - M(\Delta \lg x))^2}{2\sigma_l^2}\right), \\ \text{или} & \\ p(x) &= \frac{\lg e}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_l \cdot x} \cdot \exp\left(-\frac{(\lg x - M(\lg x))^2}{2\sigma_l^2}\right). \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Таким образом, при соблюдении условий 1 и 2 данного раздела и фиксированном значении ξ величина x распределяется по асимптотически-логнормальному закону.

* Здесь $\sigma_l = \sigma(\Delta \lg x) = \sigma(\lg x)$.

Если же величина ξ распределена по некоторому закону $p(\xi)$, то, согласно формуле (2, § 1), можно найти $p(\lg \xi)$, и в связи с независимостью $\Delta \lg x$ от ξ (а следовательно, и от $\lg \xi$) аналогично формуле (4) можно написать:

$$p(\lg x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_l} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} p(\lg \xi) \cdot \exp\left(-\frac{(\lg x - \lg \xi - M(\Delta \lg x))^2}{2\sigma_l^2}\right) d(\lg \xi), \quad (16)$$

или, учитывая, что $d(\lg \xi) = \frac{\lg e}{\xi} \cdot d\xi$ и $\xi \geq 0$:

$$p(x) = \frac{\lg e}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_l} \int_0^{\infty} \frac{1}{\xi} \cdot p(\lg \xi) \cdot \exp\left(-\frac{(\lg x - \lg \xi - M(\Delta \lg x))^2}{2\sigma_l^2}\right) \cdot d\xi. \quad (17)$$

Согласно сказанному в § 1, при малой величине $\sigma(\lg \xi)/\sigma(\Delta \lg x)$ выражение (17) должно сходиться к выражению вида (15), т. е. при относительно больших изменениях, вносимых совокупностью F (например, приближенно логнормально распределенными ошибками описываемых далее методов), распределение (17) наблюдаемых значений x становится неотличимым от логнормального при любом действительном распределении значений ξ .

Отметим одно из наглядных применений описанной модели. Представим совокупность бесконечного числа частиц. Пусть ξ — начальный вес частицы, который может меняться под влиянием случайных факторов, принимая значения x_1, x_2, \dots, x_m , где $x_m = x$ — вес, наблюдаемый после действия m факторов. Пусть действие i -фактора выражается в уменьшении x_{i-1} в $1/\delta_i$ раз, причем величины δ_i подчиняются указанным выше условиям. Тогда, согласно сказанному, при увеличении m и $\sigma(\Delta \lg x)$ и любом начальном распределении $p(\xi)$ размеров частиц с конечной дисперсией $p(x)$ асимптотически приближается (сходится) к логарифмически-нормальному.

Если уменьшение размеров частиц происходит в результате дробления на равные части, то при воздействии i -го фактора на некоторую частицу возникает не одна, как было принято выше, а $1/\delta_i$ ее дочерних частиц весом x_i каждая. Поскольку это происходит равновероятно с любой частицей, то такое пропорциональное деление не может изменить распределения $p(x)$ по сравнению с предыдущим случаем.

Таким образом, мы получили доказательство асимптотически-логнормального распределения частиц при дроблении, полученное ранее А. Н. Колмогоровым иным путем в известной работе (Колмогоров, 1941).

Не повторяя тех свойств описываемого распределения, которые относятся к величинам $\lg \xi$, $\lg x$, $\Delta \lg x$ (так как эти свойства совпадают с описанными в предыдущем разделе для ξ , x , Δx), отметим, что соотношения между статистическими параметрами для исходных значений (ξ , η) и результатов воздействия факторов F (т. е. для x и y) теперь, в отличие от равенств (6, 6а, 7, 9, 10), имеют более сложные выражения, будучи зависимыми от распределения исходных значений. Далее будет рассмотрен в общем виде вопрос поиска $p(\xi)$ по известным $p(x)$ и $p(\Delta x)$. Здесь же рассмотрим относительно простые случаи, когда исходные значения постоянны или же распределены по логнормальному закону.

Покажем также функциональную зависимость между статистическими параметрами, оцениваемыми иногда отдельно для изучаемых величин и их логарифмов. Такая зависимость позволяет сократить и упростить необходимые вычисления при обработке полученных данных.

Согласно известным свойствам логнормального распределения (Хальд, 1956),

$$M(x) = \tilde{x} \cdot \exp(D(\lg x)/(2(\lg e)^2)) = \tilde{x} \cdot \text{ant}(D(\lg x)/2 \cdot \lg e), \quad (18)$$

где ant — обозначение антилогарифма десятичного логарифма (аналогично обозначению exp для натурального логарифма); $\tilde{x} = \text{ant}(M(\lg x)) = x_{\text{ме}}$ — медианное значение x , к которому здесь сходится по вероятности среднее геометрическое выборочных значений x .

В связи с нормальным распределением величин $\Delta \lg x$ аналогично равенству (6):

$$M(\lg \xi) = M(\lg x) - M(\Delta \lg x).$$

Если $\xi = \text{const}$, то $M(\lg \xi) = \lg \xi$. Отсюда $\lg \xi = M(\lg x) - M(\Delta \lg x)$,

$$\xi = \text{ant}(M(\lg x) - M(\Delta \lg x)) = \tilde{x} / \text{ant}(M(\Delta \lg x)). \quad (19)$$

Если ξ распределяется по заведомо логнормальному закону*, то соответственно свойствам композиции нормальных распределений

$$\begin{aligned} M(\lg \xi) &= M(\lg x) - M(\Delta \lg x), \\ D(\lg \xi) &= D(\lg x) - D(\Delta \lg x), \end{aligned} \quad (20)$$

что дает параметры функций $p(\lg \xi)$ и $p(\xi)$, т. е. полностью определяет их. Кроме того, тогда, аналогично формуле (18),

$$M(\xi) = \tilde{\xi} \cdot \text{ant}(D(\lg \xi)/(2 \lg e)), \quad (21)$$

где

$$\tilde{\xi} = \text{ant}(M(\lg \xi)) = \text{ant}(M(\lg x) - M(\Delta \lg x)) = \tilde{x} \cdot \text{ant}(-M(\Delta \lg x)), \quad (21a)$$

$$\begin{aligned} \text{т. е. } M(\xi) &= \text{ant}(M(\lg x) - M(\Delta \lg x)) \cdot \text{ant}((D(\lg x) - D(\Delta \lg x))/(2 \lg e)) = \\ &= \tilde{x} \cdot \text{ant}((D(\lg x) - D(\Delta \lg x))/(2 \lg e)) \cdot \text{ant}(-M(\Delta \lg x)). \end{aligned} \quad (22)$$

Найдем оценку корреляции (линейной) логнормально распределенных величин ξ и η через оценку корреляции их логарифмов.

По определению корреляционного момента

$$K(\xi, \eta) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (\xi - M(\xi)) \cdot (\eta - M(\eta)) \cdot p(\xi, \eta) \cdot d\xi \cdot d\eta \quad (23)$$

(пределы интегрирования взяты от 0 до ∞ соответственно интервалам изменения величин ξ и η , распределенных, по условию, логнормально).

С другой стороны, согласно известной формуле для плотности вероятности двумерной случайной величины, компоненты которой распределены нормально,

$$\begin{aligned} p(\lg \xi, \lg \eta) &= \frac{1}{2\pi \cdot \sigma(\lg \xi) \cdot \sigma(\lg \eta) \cdot \sqrt{1 - (r(\lg \xi, \lg \eta))^2}} \times \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{2(1 - (r(\lg \xi, \lg \eta))^2)} \cdot \left[\frac{(\lg \xi - M(\lg \xi))^2}{(\sigma(\lg \xi))^2} - \right. \right. \\ &\left. \left. - \frac{2r(\lg \xi, \lg \eta) \cdot (\lg \xi - M(\lg \xi)) \cdot (\lg \eta - M(\lg \eta))}{\sigma(\lg \xi) \cdot \sigma(\lg \eta)} + \frac{(\lg \eta - M(\lg \eta))^2}{(\sigma(\lg \eta))^2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

* Композиция распределения $p(\lg \xi)$ с независимым нормальным распределением $p(\Delta \lg x)$ есть нормальное распределение $p(\lg x)$, если $p(\lg \xi)$ — тоже нормальное распределение. Это и может быть использовано для заключения о логнормальности неизвестного распределения $p(\xi)$, параметры которого требуется оценить при известных $p(\Delta x)$ и $p(x)$, если отношение $\sigma(\xi)/\sigma(\Delta x)$ или $\sigma(\lg \xi)/\sigma(\Delta \lg x)$ не слишком мало (иначе, согласно § 1, может быть сделано ошибочное заключение о типе распределения $M(\xi)$).



Поскольку

$$\frac{\partial(\lg \xi)}{\partial \xi} = \frac{\partial(\lg e \cdot \ln \xi)}{\partial \xi} = \frac{\lg e}{\xi}, \quad \frac{\partial(\lg \eta)}{\partial \eta} = \frac{\lg e}{\eta},$$

то согласно формуле (2, § 1)

$$p(\xi, \eta) = \frac{(\lg e)^2}{\xi \cdot \eta} \cdot p(\lg \xi, \lg \eta), \quad (25)$$

где $p(\lg \xi, \lg \eta)$ определяется выражением (24).

Подставляя выражение (25) в (23), получаем:

$$K(\xi, \eta) = \tilde{\xi} \cdot \tilde{\eta} \cdot \text{ant} \left(\frac{D(\lg \xi) + D(\lg \eta)}{2 \lg e} \right) \cdot \left[\text{ant} \left(\frac{K(\lg \xi, \lg \eta)}{\lg e} \right) - 1 \right]. \quad (26)$$

Поскольку, по определению, $D(\xi) = K(\xi, \xi)$, из формулы (26) получим выражение $D(\xi)$ через $D(\lg \xi)$, если возьмем $\eta = \xi$:

$$D(\xi) = \tilde{\xi}^2 \cdot \text{ant} \left(\frac{D(\lg \xi)}{\lg e} \right) \cdot \left[\text{ant} \left(\frac{D(\lg \xi)}{\lg e} \right) - 1 \right]. \quad (27)$$

Аналогично находится $D(\eta)$. Тогда после очевидных преобразований получаем для коэффициента корреляции выражение:

$$r(\xi, \eta) = \frac{K(\xi, \eta)}{\sqrt{D(\xi) \cdot D(\eta)}} = \frac{\text{ant} \left(\frac{K(\lg \xi, \lg \eta)}{\lg e} \right) - 1}{\sqrt{[\text{ant} \left(\frac{D(\lg \xi)}{\lg e} \right) - 1] [\text{ant} \left(\frac{D(\lg \eta)}{\lg e} \right) - 1]}}. \quad (28)$$

Согласно положению, обозначенному выше п. 1, для рассматриваемой модели

$$K(\lg \xi, \lg \eta) = K(\lg x, \lg y). \quad (29)$$

Учитывая это и равенства (20), (21a), получаем из (26) — (28) выражения дисперсии и корреляции величин ξ и η через результаты действия совокупности F :

$$D(\xi) = [\tilde{x} \cdot \text{ant}(-M(\Delta \lg x))]^2 \cdot \text{ant} \left(\frac{D(\lg x) - D(\Delta \lg x)}{\lg e} \right) \times \\ \times \left[\text{ant} \left(\frac{D(\lg x) - D(\Delta \lg x)}{\lg e} \right) - 1 \right], \quad (30)$$

$$K(\xi, \eta) = [\tilde{x} \cdot \text{ant}(-M(\Delta \lg x))]^2 \cdot [\tilde{y} \cdot \text{ant}(-M(\Delta \lg y))]^2 \times \\ \times \text{ant} \left(\frac{D(\lg x) - D(\Delta \lg x) + D(\lg y) - D(\Delta \lg y)}{2 \lg e} \right) \cdot \left[\text{ant} \left(\frac{K(\lg x, \lg y)}{\lg e} \right) - 1 \right], \quad (31)$$

$$r(\xi, \eta) = \frac{\text{ant} \left(\frac{K(\lg x, \lg y)}{\lg e} \right) - 1}{\sqrt{\left[\text{ant} \left(\frac{D(\lg x) - D(\Delta \lg x)}{\lg e} \right) - 1 \right] \cdot \left[\text{ant} \left(\frac{D(\lg y) - D(\Delta \lg y)}{\lg e} \right) - 1 \right]}}. \quad (32)$$

Теперь, полагая заданными параметры распределений величин ξ и η , найдем соответствующие параметры для их логарифмов. Из выражений (26), (27), пользуясь равенством типа (18), находим:

$$K(\lg \xi, \lg \eta) = \lg e \cdot \lg \left(\frac{K(\xi, \eta)}{M(\xi) \cdot M(\eta)} + 1 \right), \quad (33)$$

$$D(\lg \xi) = \lg e \cdot \lg \left(\frac{D(\xi)}{M(\xi)^2} + 1 \right). \quad (34)$$

Выражая аналогичным образом $D(\lg \eta)$, получаем:

$$r(\lg \xi, \lg \eta) = \frac{K(\lg \xi, \lg \eta)}{\sqrt{D(\lg \xi) \cdot D(\lg \eta)}} = \frac{\lg \left(\frac{K(\xi, \eta)}{M(\xi) \cdot M(\eta)} + 1 \right)}{\sqrt{\lg \left(\frac{D(\xi)}{M(\xi)^2} + 1 \right) \cdot \lg \left(\frac{D(\eta)}{M(\eta)^2} + 1 \right)}}. \quad (35)$$

Если значения Δx и Δy распределены по симметричному асимптотически-нормальному закону (F соответствует первой модели), то, как указывалось, они не зависят от ξ и η . Следовательно, в таком случае величины $M(\Delta x)$, $D(\Delta x)$, $M(\Delta y)$, $D(\Delta y)$ одинаковы во всем диапазоне возможных значений ξ и η при любых их распределениях. Зная эти величины и распределения значений x , y , можно найти параметры $M(\xi)$, $D(\xi)$, $M(\eta)$, $D(\eta)$, $K(\xi, \eta)$, $r(\xi, \eta)$ по формулам, приведенным в предыдущем разделе. В частности, в таком случае при логнормальном распределении значений ξ и η , согласно формулам (6, 7, 9, 10) и (33—35), при учете (21) получаем:

$$K(\lg \xi, \lg \eta) = \lg e \cdot \lg \left(\frac{K(x, y)}{[M(x) - M(\Delta x)] \cdot [M(y) - M(\Delta y)]} + 1 \right), \quad (36)$$

$$D(\lg \xi) = \lg e \cdot \lg \left(\frac{D(x) - D(\Delta x)}{[M(x) - M(\Delta x)]^2} + 1 \right), \quad (37)$$

$$r(\lg \xi, \lg \eta) = \frac{\lg \left(\frac{K(x, y)}{[M(x) - M(\Delta x)] \cdot [M(y) - M(\Delta y)]} + 1 \right)}{\sqrt{\lg \left(\frac{D(x) - D(\Delta x)}{[M(x) - M(\Delta x)]^2} + 1 \right) \cdot \lg \left(\frac{D(y) - D(\Delta y)}{[M(y) - M(\Delta y)]^2} + 1 \right)}}, \quad (38)$$

$$M(\lg \xi) = \lg \tilde{\xi} = \lg [M(\xi) \cdot \text{ant}(-D(\lg \xi) / (2 \lg e))] = \lg M(\xi) - D(\lg \xi) / (2 \lg e),$$

откуда с учетом (37):

$$\begin{aligned} M(\lg \xi) &= \lg [M(x) - M(\Delta x)] - \frac{1}{2} \lg \left(\frac{D(x) - D(\Delta x)}{[M(x) - M(\Delta x)]^2} + 1 \right) = \\ &= \lg \frac{[M(x) - M(\Delta x)]^2}{\sqrt{[M(x) - M(\Delta x)]^2 + D(x) - D(\Delta x)}}. \end{aligned} \quad (39)$$

Отсюда можно найти и величину

$$\tilde{\xi} = \text{ant}(M(\lg \xi)) = \frac{[M(x) - M(\Delta x)]^2}{\sqrt{[M(x) - M(\Delta x)]^2 + D(x) - D(\Delta x)}}. \quad (40)$$

Заметим, что при $\Delta x \equiv 0$ как частный случай следует формула

$$\tilde{\xi} = \frac{(M(\xi))^2}{\sqrt{(M(\xi))^2 + D(\xi)}}, \quad (40a)$$

дающая связь между $M(\xi)$ и $\tilde{\xi}$ при логнормальном распределении не через $D(\lg \xi)$, как это дает равенство (21), а через $D(\xi)$. Эта формула справедлива, разумеется, не только для ξ , но и для любых логнормально распределенных аргументов.

Сходимость логнормального распределения к нормальному. Как было показано выше, при выполнении условий, определяющих вторую модель, когда величины δ_i не зависят друг от друга и от величины ξ , взаимно независимыми являются также величины ξ и $\Delta \lg x'_i$, ξ и $\Delta \lg x$. Величины же $\Delta x'_i$, бывшие независимыми между собой и с величиной ξ в первой модели, здесь оказываются взаимно зависимыми.

Действительно, во второй модели

$$\Delta x'_i = x'_i - x'_{i-1} = x'_{i-1} \cdot \delta_i - x'_{i-1} = x'_{i-1} \cdot (\delta_i - 1), \quad (41)$$

т. е. при фиксированном δ_i величина $|\Delta x'_i|$ растет с увеличением x'_{i-1}

(причем значение $\Delta x'_i$ положительно, когда $\delta_i > 1$, и отрицательно — когда $\delta_i < 1$). Поскольку $x'_{i-1} = x'_{i-2} \cdot \delta_{i-1}$, $x'_{i-2} = x'_{i-3} \cdot \delta_{i-2}$, ..., $x'_1 = \xi \cdot \delta_1$, то $\Delta x'_i$ зависит от каждого из значений x_j и Δx_j , где $j < i$.

Это означает, что точки определенного пространства значений x , где $K(|\Delta x'_i|, x'_j) > 0$ и имеется зависимость между величинами $\Delta x'_i = x'_i - x'_{i-1}$, $\Delta x'_j = x'_j - x'_{j-1}$, операцией логарифмирования отображаются в пространство точек $\lg x$, где $K(|\Delta \lg x'_i|, \lg x'_j) = 0$ и отсутствует зависимость между величинами $\Delta \lg x'_i = \lg x'_i - \lg x'_{i-1}$, $\Delta \lg x'_j = \lg x'_j - \lg x'_{j-1}$.

Во избежание недоразумений заметим, что применение операции логарифмирования не к значениям x_i , а к величинам $\Delta x'_i$ не привело бы к устранению зависимости между результатами: при зависимых $\Delta x'_i$ зависимы $\lg(\Delta x'_i)$, независимыми же при поставленных условиях являются только $\Delta \lg x'_i$.

Соответственно увеличению $|\Delta x'_i|$ с ростом x'_i распределение Δx (и x при фиксированном ξ) оказывается правоасимметричным, что является характерной чертой логнормального распределения.

Существует условие, при котором зависимость между $\Delta x'_i$ и $\Delta x'_j$ становится сколько угодно малой.

По условиям рассматриваемой модели

$$\Delta x'_i = x'_i - x'_{i-1} = \xi \cdot \prod_{j=1}^i \delta_j - \xi \cdot \prod_{j=1}^{i-1} \delta_j = \xi \cdot (\delta_i - 1) \cdot \prod_{j=1}^{i-1} \delta_j.$$

Пусть $\delta_j \rightarrow 1$ для каждого j . Тогда $\prod_{j=1}^{i-1} \delta_j \rightarrow 1$ и согласно последнему равенству $\Delta x'_i \rightarrow \xi \cdot (\delta_i - 1)$, т. е. $\Delta x'_i$ стремится к величине, пропорциональной разности $(\delta_i - 1)$, теряя зависимость от любого значения δ_j и $\Delta x'_j$ ($j \neq i$): в то время как величины δ_i при поставленном условии не могут меняться в значительное число раз, разность $\delta_i - 1$ может меняться в любое число раз при малом абсолютном случайном изменении величины $\delta_i \approx 1$. По условиям модели для δ_i , при этом $|\Delta x'_i| \ll \sum_{j=1}^{i-1} \Delta x'_j + \sum_{j=i+1}^L \Delta x'_j$. Но тогда при $k \rightarrow \infty$ и $D(\Delta x'_i)/D(\Delta x) \rightarrow 0$ этого, в силу центральной предельной теоремы, достаточно, чтобы распределение Δx сходилось к нормальному^{*)}.

Условие $\delta_i \rightarrow 1$ для всех i означает $\sum_{i=1}^L |\lg \delta_i| \rightarrow 0$, т. е. $D(\Delta \lg x) \rightarrow 0$.

При фиксированном ξ в силу равенства $\Delta \lg x = \lg x - \lg \xi$ имеем $D(\Delta \lg x) = D(\lg x)$, поскольку дисперсия постоянной величины равна нулю. Следовательно, сходимость к нормальному закону логнормаль-

*) Возможность представления Δx при рассматриваемой модели в виде суммы асимптотически независимых величин, если $\delta_i \rightarrow 1$ при всех i , можно доказать и другим, менее наглядным, но более формализованным образом: согласно формуле (41), $x'_1 = \xi + \Delta x'_1 = \xi + \xi(\delta_1 - 1)$; $x'_2 = x'_1 + \Delta x'_2 = \xi + \xi(\delta_1 - 1) + [\xi + \xi(\delta_1 - 1)](\delta_2 - 1) = \xi + \xi(\delta_1 - 1) + \xi(\delta_2 - 1) + \xi(\delta_1 - 1)(\delta_2 - 1)$.

При $\delta_1, \delta_2 \approx 1$ последним слагаемым можно пренебречь как малой величиной второго порядка. То есть при $\delta_1, \delta_2 \rightarrow 1$: $x'_2 \rightarrow \xi + \sum_{i=1}^2 \Delta x'_i$, где $\Delta x'_i = \xi(\delta_i - 1)$ — величины, статистически независимые между собой. Аналогично: $x = x'_L \rightarrow \xi + \sum_{i=1}^L \Delta x'_i$, или $\Delta x' = x - \xi \rightarrow$

$\sum_{i=1}^L \Delta x'_i$, т. е. $\Delta x'$ стремится к сумме независимых величин.

ного распределения величины x определяется условием $D(\lg x) \rightarrow 0$. Но для логнормального распределения любой величины должно быть справедливо равенство, аналогичное равенству (34):

$$D(\lg x) = \lg e \cdot \lg \left(\frac{D(x)}{(M(x))^2} + 1 \right). \quad (42)$$

Согласно этому равенству, при $D(\lg x) \rightarrow 0$ должно быть $D(x)/(M(x))^2 \rightarrow 0$, или, что то же самое, $\sigma(x)/M(x) \rightarrow 0$.

Трансформация любой кривой, описываемой определенной функцией, при определенном изменении параметров не зависит от причин этого изменения. Это очевидное тривиальное утверждение означает: если действие какой-то модели приводит к определенной трансформации кривой, то к такой же трансформации приведет действие любой другой модели, при условии такого же изменения параметров кривой. Следовательно, доказанное положение может быть сформулировано в виде общего утверждения, не ограниченного использованной моделью: логнормальное распределение величины x сходится к нормальному при $\sigma(x)/M(x) \rightarrow 0$ (или $\sigma(\lg x) \rightarrow 0$).

Это означает: для любого фиксированного значения $\sigma(x)$ можно найти такое (достаточно большое) значение $M(x)$ и для любого фиксированного значения $M(x) > 0$ можно найти такое (достаточно малое) значение $\sigma(x)$, что величина $p(x)$, вычисленная для производительного значения x по формуле нормального распределения, отличается от величины $p(x)$, вычисленной по формуле логнормального распределения, меньше, чем на ϵ , где $\epsilon > 0$ — сколь угодно малая, наперед заданная величина.

Полагая $x = y - y_m$ или $x = y_s - y$ и учитывая, что при фиксированных y_m и y_s справедливы равенства $\sigma(y - y_m) = \sigma(y)$, $\sigma(y_s - y) = \sigma(y)$, получаем из сформулированного положения аналогичные выводы о сходимости к нормальному распределению так называемых обобщенных логнормального и обратного логнормального распределений y , соответственно при $\sigma(y)/M(y - y_m) \rightarrow 0$ и $\sigma(y)/M(y_s - y) \rightarrow 0$.

Иными словами, переходя вновь к прежним обозначениям, но в более общей форме, можно считать доказанным следующее положение:

П. 2. Логнормальные распределения величин $x - x_m$ и $x_s - x$ сходятся к нормальному при $\sigma(\lg x) \rightarrow 0$ или соответственно при $\sigma(x)/M(x) - x_m \rightarrow 0$ и $\sigma(x)/(x_s - M(x)) \rightarrow 0$.

Важно, что в отличие от преобразования к нормальному закону операцией логарифмирования величин x , сходимость к нему логнормального распределения при $\sigma(x)/M(x) \rightarrow 0$ в равной мере справедлива для x и Δx , т. е. здесь возможна подстановка Δx вместо x .

Если $\xi = \text{const}$ и при наблюдаемом нормальном распределении систематическое смещение отсутствует, т. е. если $M(\Delta x) = 0$, то в случае первой модели $\xi = M(x)$; в аналогичном случае при второй модели, когда $M(\Delta \lg x) = 0$, в соответствии с (21a), $\xi = \tilde{x}$. При $D(\lg x) \rightarrow 0$, на основании (18), $M(x) \rightarrow \tilde{x}$. Следовательно, согласно п. 2, при $\sigma(x)/M(x) \rightarrow 0$ (или $\sigma(\lg x) \rightarrow 0$) сходятся распределения величины x , обусловленные действием на ξ факторов, соответствующих первой и второй моделям, с параметрами соответственно $\sigma(x) = \sqrt{D(x)}$ и $\sigma(\lg x) = \sqrt{D(\lg x)}$, определяемыми соотношением $D(x)$ и $D(\lg x)$ по формуле (42).

Наглядно это иллюстрируется на рис. 1, где принято $\sigma(x) = 0,1$. Как видим, при $\xi = 1$, когда $\sigma(x)/M(x) = \sigma(x)/\xi = 0,1$ и $\sigma(\lg x) = 0,0432$, кривые I и II, соответствующие нормальному и логнормальному распределениям, довольно близки. При уменьшении же ξ до 0,05 и увеличении $\sigma(x)/M(x)$ до 2 ($\sigma(\lg x) = 0,422$) кривые оказываются весьма различными.

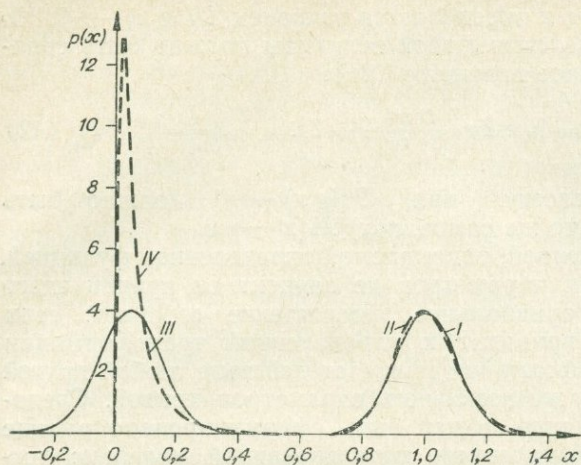


Рис. 1. Нормальное и логнормальное распределения случайных величин, $\sigma(x) = 0,1$.

I — при нормальном распределении величины x , $\xi = 1$; II — при логнормальном распределении величины x , $\xi = 1$, $\sigma(\lg(x)) = 0,0432$; III — при нормальном распределении величины x , $\xi = 0,05$; IV — при логнормальном распределении величины x , $\xi = 0,05$, $\sigma(\lg(x)) = 0,422$.

$\sigma(\Delta \lg x)$ является зависимой от ξ : нетрудно видеть, что она уменьшается с увеличением ξ (и $M(x)$). На рис. 1 для определенных значений ξ (когда $\sigma(x) = \sigma(\Delta x)$) показан случай сохранения $\sigma(x)$.

Известны факты приближенно нормального распределения концентраций в пробах из одного образца горной породы в то время как в совокупности проб, взятых из этой породы на значительной территории (из гранитного массива и т. п.), фиксируется приближенно логнормальное распределение (Смирнов, 1963; Vistelius, 1960). Теперь, с помощью п. 2, нетрудно объяснить такие явления. Действительно: пробы, взятые из одного относительно небольшого образца на небольших расстояниях друг от друга, при определенных известных условиях имеют и сравнительно близкие концентрации, т. е. величина $\sigma(C)$ тогда мала и $\sigma(C)/M(C) \approx 0$. Это обуславливает, согласно п. 2, малое различие логнормального и нормального распределений, т. е. здесь не проявляются специфические отличия первого из них, в частности асимметрия, обсуждаемая в упомянутых работах. При опробовании же значительных пространств тех же пород проявляются различия концентраций на больших расстояниях. Эти изменения могут быть достаточны для проявления специфики действительного распределения.

g-распределение

Известен ряд видов распределений, при которых преобразование к нормальному закону производится операцией логарифмирования. В частности, Кептейн и ван Ювен (Kapteyn, van Uven, 1916), а также другие исследователи рассматривали преобразующие функции $g_1(x) = \lg(x - \alpha)$ при $x > \alpha$ и $g_2(x) = -\lg(\alpha - x)$ при $x < \alpha$, а затем и их обобщение — функцию $g(x) = \lg(\alpha_2 - x) - \lg(x - \alpha_1)$ при $\alpha_1 < x < \alpha_2$ (van Uven, 1917). Видоизменением такой функции является $g(x) = \lg \frac{x - x_m}{x_s - x}$, где (x_m, x_s) — интервал возможных значений x . Распреде-

ние величины x , при котором значения $\lg \frac{x - x_m}{x_s - x}$ распределены нормаль-

При $M(\Delta x) \neq 0$ и (или) $M(\Delta \lg x) \neq 0$ сказанное справедливо для кривых распределений, смещенных соответствующим образом.

Совокупность F , подчиняющаяся условиям второй модели, характеризуется определенной величиной $\sigma(\Delta \lg x)$. Но при неизменности этой величины значение $\sigma(\Delta x)$, согласно формуле (42), увеличивается с увеличением ξ , а следовательно, и с увеличением $M(x)$, в отличие от случая действия совокупности F , подчиняющейся первой модели, когда независимой от ξ является величина $\sigma(\Delta x)$. В случае же первой модели, наоборот, величина

но, рассматривалось С. Д. Уилксом и сравнительно подробно описано в работе (Johnson, 1949). По принятой терминологии, оно является четырехпараметрическим логнормальным распределением (Aitchison, Brown, 1957; Добрецов, Маковская, 1967; и др.). Условно для краткости мы будем называть его g -нормальным распределением (по аналогии с логнормальным) или еще короче — просто g -распределением.

До сих пор названное распределение изучалось все же довольно мало, несмотря на отмечавшиеся рядом исследователей свойства, благоприятные для его использования, в том числе в геохимии (Боровко, 1964; и др.). Это связано, вероятно, со сложностью оценки его параметров при неавтоматизированных вычислениях. Однако теперь, при широком применении вычислительной техники, такая трудность отпадает. Поэтому приведем дополнительные исследования свойств этого распределения, нужные для уточнения условий его применения.

Построим статистическую модель, приводящую к этому распределению.

Пусть система F характеризуется тем, что действие любого (i -го) фактора приводит к изменению в δ_i раз отношения расстояния результата от x_m к расстоянию его от x_s :

$$\frac{x'_i - x_m}{x_s - x'_i} : \frac{x'_{i-1} - x_m}{x_s - x'_{i-1}} = \delta_i, \quad (43)$$

причем величины δ_i подчиняются условиям, названным в предыдущем разделе.

Обозначим

$$\frac{x'_i - x_m}{x_s - x'_i} = G(x'_i). \quad (44)$$

Тогда

$$G(x) = \frac{x - x_m}{x_s - x} = G(\xi) \cdot \prod_{i=1}^L \delta_i. \quad (45)$$

В связи с аналогией между формулами (45) и (11) и соответствующими условиями при $\xi = \text{const}$ ($D(\xi) = 0$) значения $G(x)$ распределяются по асимптотически-логнормальному закону, т. е. величины

$g(x) = \lg G(x) = \lg \frac{x - x_m}{x_s - x}$ распределяются по асимптотически-нормальному закону, как и величины $\Delta g(x) = g(x) - g(\xi)$. Поэтому, полагая для простоты $M(\Delta g(x)) = 0$ (что не нарушает общности делаемых далее выводов), для аппроксимации распределения g примем формулу нормального распределения

$$p(g(x)) = p(\Delta g(x)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma(\Delta g(x))} \cdot \exp\left(-\frac{(g(x) - g(\xi))^2}{2(\sigma(\Delta g(x)))^2}\right), \quad (46)$$

а при различных ξ ($D(\xi) \neq 0$)

$$p(g(x)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma(\Delta g(x))} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} p(g(\xi)) \cdot \exp\left(-\frac{(g(x) - g(\xi))^2}{2(\sigma(\Delta g(x)))^2}\right) dg(\xi). \quad (47)$$

Найдем теперь $p(x)$ для такого распределения при фиксированном ξ . Полагая в формуле (2, § 1) $\omega_i(x) \equiv \omega(x) = g(x)$ и учитывая, что

$$\frac{\partial g(x)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lg \frac{x - x_m}{x_s - x} \right) = \frac{(x_s - x_m) \cdot \lg e}{(x - x_m) \cdot (x_s - x)},$$

получим соответственно формуле (46):

$$p(x) = \frac{(x_s - x_m) \cdot \lg e}{\sqrt{2\pi} (x - x_m) (x_s - x) \cdot \sigma(g(x))} \cdot \exp\left(-\frac{(g(x) - g(\xi))^2}{2(\sigma(g(x)))^2}\right) \quad (48)$$

(в связи с фиксированностью ξ здесь $\sigma(\Delta g(x)) = \sigma(g(x))$). Аналогично нетрудно получить выражение для $p(x)$ при произвольном распределении $p(\xi)$ из формулы (47).

Для иллюстрации подчинения F условиям описанной модели можно привести следующий пример.

Представим некоторый постоянный объем V горной породы, содержащий μ в различных формах — изменяемой и не изменяемой действующими на V процессами. Тогда концентрация μ не может опуститься ниже некоторой величины $x_m > 0$. Пусть в V имеются также другие вещества, причем в случае убыли μ они заполняют освобождающееся место, а в случае увеличения количества μ их содержание соответственно уменьшается (это может происходить как в результате приноса — выноса веществ, так и при метасоматическом их преобразовании). Если среди этих веществ имеются непреобразуемые формы, то концентрация μ не может превысить некоторой величины $x_s < 1$ (100%).

Концентрацию μ после воздействия i -го фактора обозначим x_i . Тогда концентрация способной к изменению доли μ равна $x_i - x_m$, а концентрация способной к изменению доли других веществ равна $x_s - x_i$. Если действие каждого (i -го) фактора заключается в независимом изменении соотношения этих долей в δ_i раз и если значения δ_i подчиняются второму условию предыдущей модели (т. е. влияние каждого отдельного фактора было бы относительно невелико), то сказанного достаточно для удовлетворения требованиям обсуждаемой модели. Следовательно, значения концентраций μ , наблюдаемые в объеме V и являющиеся различными реализациями одной указанной совокупности процессов, распределяются по асимптотически- g -нормальному закону.

Нетрудно видеть, что последняя модель, предусматривающая возможное ограничение значений x снизу и сверху, предпочтительнее двух предыдущих для многих геохимических задач, где изучается распределение концентраций. Кроме того, формы кривых $p(x)$ при фиксированных значениях ξ , даваемые предыдущими моделями, являются частными предельными случаями форм кривых $p(x)$, даваемых последней моделью. Докажем это.

Сходимость g -нормального распределения к логнормальному и нормальному. В этом разделе будет показано, что нормальное и логнормальное (простое, обратное и обобщенное) распределения можно рассматривать как частные предельные случаи g -распределения, к которым оно сходится при определенных условиях. Это важно для геохимических целей, так как позволяет единообразно обрабатывать материалы при нормальном и логнормальном распределениях, а также при бесконечном числе промежуточных условий.

Согласно выражению (43),

$$x_i' = \frac{x_s (x_{i-1}' - x_m) \cdot \delta_i + x_m (x_s - x_{i-1}')}{x_s - x_{i-1}' + (x_{i-1}' - x_m) \cdot \delta_i} \quad (49)$$

Рассмотрим изменение этой величины при условии $\xi \rightarrow x_m$, или, что то же самое, $x_{me} \rightarrow x_m$ (поскольку функция g является симметризирующей для третьей модели, то $\xi = g^{-1}(M(g(x))) = x_{me}$).

По определению, $\xi = x_0$. Поэтому поставленное условие можно записать и в виде $x_0 \rightarrow x_m$. Тогда при $i=1$ получаем, согласно (49), для любого конечного $\delta_i: x_1' \rightarrow x_m$. Отсюда, задаваясь $i=2$, получаем по

тому же выражению (49): $x'_2 \rightarrow x_m$. Аналогично: $x'_3 \rightarrow x_m, \dots, x'_L \rightarrow x_m$.
 Но тогда для любого i : $x_s - x'_{i-1} \rightarrow x_s - x_m$, $x_s - x_i \rightarrow x_s - x_m$, $(x_s - x'_{i-1}) / (x_s - x'_i) \rightarrow 1$ и, согласно (43), $\delta_i \rightarrow \frac{x'_i - x_m}{x'_{i-1} - x_m}$.

Отсюда:

$$x'_i - x_m \rightarrow (x'_{i-1} - x_m) \cdot \delta_i. \quad (50)$$

Пусть теперь $x_s \rightarrow \infty$. Тогда, согласно (49), $x'_i \rightarrow (x'_{i-1} - x_m) \cdot \delta_i + x_m$, откуда также получаем выражение (50).

Аналогично выражению (50) можем написать: $x'_{i-1} - x_m \rightarrow (x'_{i-2} - x_m) \cdot \delta_{i-1}$. Подставляя последнее выражение в (50), получаем: $x'_i - x_m \rightarrow (x'_{i-2} - x_m) \cdot \delta_{i-1} \cdot \delta_i$. Совершая такие подстановки от $i=L$ до $i=1$ и учитывая, что $x = x'_L$, получаем:

$$(x - x_m) \rightarrow (\xi - x_m) \cdot \prod_{i=1}^L \delta_i. \quad (51)$$

По аналогии выражений (51) и (11) с учетом, что величины δ_i подчиняются условиям второй модели, получаем: при $\xi = x_{me} \rightarrow x_m$ и (или) $x_s \rightarrow \infty$ распределение величины $x - x_m$, обусловленное третьей моделью, сходится к логнормальному. Но распределение x в третьей модели асимптотически- g -нормально. Поэтому в силу уже использовавшегося положения о зависимости трансформации функции только от изменения параметров независимо от причин этого изменения, т. е. от конкретного выражения модели, получаем общий вывод: при $x_{me} \rightarrow x_m$ и (или) $x_s \rightarrow \infty$ g -распределение величины x сходится к логнормальному распределению величины $x - x_m$. В частном случае, при $x_m = 0$, осуществляется сходимость к простому логнормальному распределению величины x .

Заметим, что условия $x_{me} \rightarrow x_m$ и (или) $x_s \rightarrow \infty$ можно объединить в одно:

$$\frac{x_{me} - x_m}{x_s - x_{me}} = G(x_{me}) \rightarrow 0, \quad (52)$$

поскольку это выражение справедливо в том и только том случае, если выполняется хотя бы одно из названных двух условий.

Логарифмируя выражение (51), получаем: $\lg(x - x_m) \rightarrow \lg(\xi - x_m) + \sum_{i=1}^L \lg \delta_i$. Применяя к этому выражению оператор дисперсии и учитывая, что $\lg(\xi - x_m)$ здесь — величина постоянная, т. е. $D(\lg(\xi - x_m)) = 0$, получаем, что при условии (52) $D(\lg(x - x_m)) \rightarrow D\left(\sum_{i=1}^L \lg \delta_i\right)$. Но с другой стороны, согласно (45), для рассматриваемой модели всегда $g(x) = \lg G(x) = \lg G(\xi) + \sum_{i=1}^L \lg \delta_i$, т. е. при фиксированном значении $G(\xi)$ $D(g(x)) = D\left(\sum_{i=1}^L \lg \delta_i\right)$. Следовательно, при $G(x_{me}) \rightarrow 0$ имеем $D(\lg(x - x_m)) \rightarrow D(g(x))$, и при малых величинах $G(x_{me})$ можно принимать

$$D(g(x)) \approx D(\lg(x - x_m)). \quad (53)$$

Пусть теперь $\xi = x_{me} \rightarrow x_s$. Тогда, проведя рассуждения, аналогичные предыдущим, получаем, что при этом для всех i : $x'_i \rightarrow x_s$, $x'_i - x_m \rightarrow x_s - x_m$ и $\delta_i \rightarrow \frac{x_s - x'_{i-1}}{x_s - x'_i}$, или $x_s - x'_i \rightarrow (x_s - x'_{i-1}) \cdot \frac{1}{\delta_i}$.

Путем небольших преобразований тот же результат получим при $x_m \rightarrow -\infty$. Отсюда, подобно предыдущему,

$$(x_s - x) \rightarrow (x_s - \xi) \cdot \prod_{i=1}^L \frac{1}{\delta_i} \quad (54)$$

при $\xi \rightarrow x_s$ и (или) $x_m \rightarrow -\infty$.

Если величины δ_i удовлетворяют условиям второй модели, то этим условиям удовлетворяют и величины $\frac{1}{\delta_i}$. Следовательно, величина $x_s - x$ распределяется по асимптотически-логнормальному закону. Это приводит к выводу: при $x_{me} \rightarrow x_s$ и (или) $x_m \rightarrow -\infty$ g -распределение величины x сходится к логнормальному распределению величины $x_s - x$.

Заметим, что условия $x_{me} \rightarrow x_s$ и (или) $x_m \rightarrow -\infty$ можно объединить в одно, как это было сделано для выражения (52):

$$\text{или} \quad \left. \begin{aligned} \frac{x_{me} - x_m}{x_s - x_{me}} = G(x_{me}) \rightarrow \infty, \\ 1/G(x_{me}) \rightarrow 0. \end{aligned} \right\} \quad (55)$$

При этом, как и в предыдущем случае, $D(\lg(x_s - x)) \rightarrow D(g(x))$, и при больших значениях $G(x_{me})$, т. е. малых значениях $1/G(x_{me})$, можно принять

$$D(g(x)) \approx D(\lg(x_s - x)). \quad (56)$$

Найденные закономерности позволяют легко аппроксимировать g -распределение величины x при малых $G(x_{me})$ или $1/G(x_{me})$ логнормальным распределением величин $x - x_m$ и $x_s - x$ соответственно. Действительно, в силу свойства медианы величина x_{me} при этом одинакова для обоих распределений — аппроксимируемого и аппроксимирующего. Второй же необходимый для такой аппроксимации параметр — дисперсия — определяется равенствами (53) или (56).

Как было показано, в рассматриваемой модели при $x_{me} = \xi \rightarrow x_m$, к величине x_m стремятся все x'_i (и $x = x'_L$). Следовательно, при этом и $M(x) \rightarrow x_m$. Аналогично, при $x_{me} \rightarrow x_s$ также $M(x) \rightarrow x_s$. Поэтому в условиях $\frac{x_{me} - x_m}{x_s - x_{me}} \rightarrow 0$ и $\frac{x_{me} - x_m}{x_s - x_{me}} \rightarrow \infty$ можно заменить x_{me} на $M(x)$.

При указанной для предельного случая связи между $D(g(x))$, с одной стороны, и $D(\lg(x - x_m))$ и $D(\lg(x_s - x))$, с другой стороны, пользуясь приведенной для предыдущей модели связью между $D(x)$ и $D(\lg x)$ (с соответствующей подстановкой величин $x - x_m$ или $x_s - x$ вместо x), получаем для этого случая очевидную связь между $D(g(x))$ и $D(x)$.

Аналогично тому, как это было сделано при рассмотрении второй модели, можно показать, что при независимости величин $\Delta g(x'_i)$ между собой и от величины $g(\xi)$ (а следовательно, и от ξ) значения Δx_i в рассматриваемом случае оказываются зависимыми между собой и от ξ . Наличие такой зависимости, как и в предыдущей модели, выражается в асимметрии кривой $p(x)$. Но здесь кривая $p(x)$ имеет переменную асимметрию: правую при $x_{me} \in \left(x_m, \frac{x_m + x_s}{2}\right)$ и левую при $x_{me} \in \left(\frac{x_m + x_s}{2}, x_s\right)$. Соответственно этому имеет различные знаки величина $K(|\Delta x'_i|, x'_{i-1})$. Это согласуется со свойствами логнормальных распределений, к которым, как показано, сходится g -распределение при $x_{me} \rightarrow x_m$ и $x_{me} \rightarrow x_s$.

В предостережение от ошибок заметим также, что применение операции g не к x'_i , а к $\Delta x'_i$ не приводит к такому эффекту.

В то же время, как и в случае второй модели, можно показать, что при $\delta_i \rightarrow 1$ для всех i g -распределение величин x , и Δx сходится к нормальному.

Согласно равенству (49),

$$x'_1 = \frac{x_s (\xi - x_m) \cdot \delta_1 + x_m (x_s - \xi)}{x_s - \xi + (\xi - x_m) \cdot \delta_1}, \quad (57)$$

откуда после очевидных преобразований получаем:

$$\Delta x'_1 = x'_1 - \xi = \frac{(x_s - \xi) \cdot (\xi - x_m)}{x_s - \xi + (\xi - x_m) \cdot \delta_1} \cdot (\delta_1 - 1). \quad (58)$$

При $\delta_1 \rightarrow 1$, как нетрудно видеть, $\Delta x'_1 \rightarrow \frac{(x_s - \xi) \cdot (\xi - x_m)}{x_s - x_m} \cdot (\delta_1 - 1)$ (сомножитель δ_1 в знаменателе выражения (58) приравнен при этом к 1, так как малое отклонение его от 1 мало влияет на относительное изменение $\Delta x'_i$; малое же изменение близкой к единице величины δ_1 в сомножителе $(\delta_1 - 1)$ может менять $\Delta x'_i$ во много раз).

Аналогично:

$$\Delta x'_2 = x'_2 - x'_1 = \frac{(x_s - x'_1) \cdot (x'_1 - x_m)}{x_s - x'_1 + (x'_1 - x_m) \cdot \delta_2} \cdot (\delta_2 - 1).$$

Подставляя в числитель вместо значения x'_1 его выражение по формуле (58), получаем:

$$\Delta x'_2 = \frac{(x_s - x_m)^2 \cdot (x_s - \xi) \cdot (\xi - x_m) \cdot \delta_1}{[x_s - \xi + (\xi - x_m) \cdot \delta_1]^2 \cdot [x_s - x'_1 + (x'_1 - x_m) \cdot \delta_1]} \cdot (\delta_2 - 1).$$

При $\delta_1, \delta_2 \rightarrow 1$ получаем отсюда:

$$\Delta x'_2 \rightarrow \frac{(x_s - \xi) (\xi - x_m)}{x_s - x_m} \cdot (\delta_2 - 1).$$

Тогда

$$x'_2 = \xi + \Delta x'_1 + \Delta x'_2 \rightarrow \xi + \frac{(x_s - \xi) \cdot (\xi - x_m)}{x_s - x_m} \cdot (\delta_1 - 1) + \frac{(x_s - \xi) (\xi - x_m)}{x_s - x_m} \cdot (\delta_2 - 1) = \xi + \Delta x_1^* + \Delta x_2^*,$$

где

$$\Delta x_1^* = \frac{(x_s - \xi) \cdot (\xi - x_m)}{x_s - x_m} \cdot (\delta_1 - 1), \quad \Delta x_2^* = \frac{(x_s - \xi) \cdot (\xi - x_m)}{x_s - x_m} \cdot (\delta_2 - 1) -$$

— взаимно независимые величины (при фиксированных значениях ξ, x_m, x_s изменения Δx_1^* и Δx_2^* определяются только изменениями взаимно независимых значений δ_1 и δ_2). Обозначая

$$\Delta x_i^* = \frac{(x_s - \xi) \cdot (\xi - x_m)}{x_s - x_m} \cdot (\delta_i - 1) \quad (59)$$

и учитывая, что $x = x'_L$, $\Delta x = x - \xi$, получаем в результате:

$$x \rightarrow \xi + \sum_{i=1}^L \Delta x_i^*, \quad \Delta x \rightarrow \sum_{i=1}^L \Delta x_i^*, \quad (60)$$

где величины Δx_i^* взаимно независимы. Согласно первой модели, это означает, что при поставленном условии ($\delta_i \rightarrow 1$ для всех i) третья модель приводит к сходимости g -распределения к нормальному.

Но явление $\delta_i \rightarrow 1$ для всех i означает $\sigma(g(x)) \rightarrow 0$. Из зависимости между Δx , Δx_i^* и δ_i видно, что при этом и $\sigma(\Delta x) = \sigma(x) \rightarrow 0$. Используя вновь положение о независимости трансформации кривой при изменении ее параметров от причин этого изменения, получаем общий вывод о сходимости g -распределения к нормальному при $\sigma(g(x)) \rightarrow 0$ (или $\sigma(x) \rightarrow 0$).

Величина $\frac{(x_s - \xi) \cdot (\xi - x_m)}{x_s - x_m}$ растет с приближением ξ к середине интервала (x_m, x_s) и с увеличением этого интервала за счет удаления одного или обоих его концов от ξ . Поэтому, согласно (59), при одних и тех же δ_i , когда обеспечена определенная близость рассматриваемого распределения к нормальному, величины Δx_i^* , а с ними и $\sigma(x)$ соответствующего нормального распределения растут, если $\xi \rightarrow \frac{x_m + x_s}{2}$, $x_m \rightarrow -\infty$, $x_s \rightarrow \infty$. Наоборот, при постоянном $\sigma(x)$ при названных условиях улучшается сходимость g -распределения к нормальному, так как для сохранения этого постоянства величины δ_i в модели должны приближаться к единице. Поэтому, раздвигая границы интервала (x_m, x_s) , т. е. при $x_m \rightarrow -\infty$, $x_s \rightarrow \infty$, можно получить любую степень близости g -распределения к заданному нормальному для любого значения $\sigma(x)$. Таким образом, g -распределение сходится к нормальному и при фиксированном значении $\sigma(x)$, если $x_m \rightarrow -\infty$ и $x_s \rightarrow \infty$.

В связи с тем, что при $\sigma(x) \rightarrow 0$ и неизменных других параметрах сходятся к нормальному g -распределение величины x и логнормальные распределения величин $x - x_m$ и $x_s - x$, при данном условии g -распределение и названные два логнормальных распределения сходятся между собой. Объединяя это условие с обсужденными ранее условиями сходимости g -нормального и логнормальных распределений, получаем с учетом показанной выше возможности замены x_{me} на $M(x)$ и выражения $G(M(x)) \rightarrow \infty$ на выражение $1/G(M(x)) \rightarrow 0$: g -распределение сходится к логнормальным распределениям величин $x - x_m$ и $x_s - x$ соответственно при $\frac{\sigma(x) \cdot (M(x) - x_m)}{x_s - M(x)} \rightarrow 0$ и $\frac{\sigma(x) \cdot (x_s - M(x))}{M(x) - x_m} \rightarrow 0$.

Последние два выражения в рассматриваемых случаях (когда стремится к нулю либо только числитель, либо только знаменатель любого из них) эквивалентны выражениям

$$\frac{\sqrt{\sigma(x) \cdot (M(x) - x_m)}}{x_s - M(x)} \rightarrow 0 \quad \text{и} \quad \frac{\sqrt{\sigma(x) \cdot (x_s - M(x))}}{M(x) - x_m} \rightarrow 0. \quad (61)$$

Левые части этих выражений, вычисляясь для конкретных распределений, являются их существенными математическими характеристиками, будучи независимыми от единиц измерения, в то время как предыдущие два выражения имеют размерность x и различные числовые значения левых частей для одних и тех же распределений в зависимости от единиц измерения.

Найденные же условия сходимости g -распределения к нормальному ($x_m \rightarrow -\infty$, $x_s \rightarrow \infty$ или $\sigma(x) \rightarrow 0$ при фиксированных x_m и x_s) можно выразить как одновременное выполнение выражений

$$\frac{\sigma(x)}{M(x) - x_m} \rightarrow 0 \quad \text{и} \quad \frac{\sigma(x)}{x_s - M(x)} \rightarrow 0. \quad (62)$$

Таким образом, доказано положение:

П. 3. g -Распределение величины x сходится к логнормальному распределению величины $x - x_m$ при $\frac{\sqrt{\sigma(x) \cdot (M(x) - x_m)}}{x_s - M(x)} \rightarrow 0$, к лог-

нормальному распределению величины $x_s - x$ при $\frac{\sqrt{\sigma(x) \cdot (x_s - M(x))}}{M(x) - x_m} \rightarrow 0$
и к нормальному распределению величины x , если одновременно

$$\frac{\sigma(x)}{M(x) - x_m} \rightarrow 0 \quad \text{и} \quad \frac{\sigma(x)}{x_s - M(x)} \rightarrow 0.$$

При одновременном выполнении условий (62), т. е. при значении $\sigma(x)$, малом по сравнению как с $M(x) - x_m$, так и с $x_s - M(x)$, соблюдаются и оба условия (61). При этом g -распределение величины x не отличается от нормального и логнормальных распределений величин $x - x_m$ и $x_s - x$. Следовательно, неразличимы и они между собой.

Следствие: если значение $\sigma(x)$ мало по сравнению с каждой из величин $M(x) - x_m$ и $x_s - M(x)$, то распределение величины x приближенно подчиняется одновременно нормальному, логнормальному и g -нормальному законам.

Формулы связи параметров g -распределения с параметрами аппроксимирующего его логнормального распределения, а также параметров логнормального распределения с параметрами нормального были даны выше; как указывалось, в них следует лишь заменить при необходимости x на $x - x_m$ или на $x_s - x$. Найденная же взаимная сходимость всех этих распределений означает возможность вычисления при указанных условиях (62) по упомянутым формулам связи параметров любого из этих распределений, если известны параметры одного из них. Так, если при известных x_m , x_s по исходным значениям x подсчитаны параметры $M(x)$ и $D(x)$, то в связи с удовлетворением (хотя бы приближенным) распределения величины x нормальному закону значение $M(x)$ принимается за $x_{ме}$, $M(x - x_m)$ — за $x_{ме} - x_m$ и $M(x_s - x_{ме})$ — за $x_s - x_{ме}$. Тогда для обобщенных логнормальных и g -нормального распределений получаем, согласно равенству соответствующих им параметров математических ожиданий и медиан: $M(\lg(x - x_m)) = \lg(x_{ме} - x_m)$ или $M(\lg(x_s - x)) = \lg(x_s - x_{ме})$ (поскольку медианные значения величин $\lg(x - x_m)$ и $\lg(x_s - x)$ равны соответственно $\lg(x_{ме} - x_m)$ и $\lg(x_s - x_{ме})$); $M(g(x)) = g(x_{ме})$. Второй необходимый параметр — дисперсию (или соответствующую ей величину среднего квадратического отклонения) для логнормальных распределений найдем по равенству (42):

$$D(\lg(x - x_m)) \approx \lg e \cdot \lg\left(\frac{D(x)}{(M(x) - x_m)^2} + 1\right)$$

или

$$D(\lg(x_s - x)) \approx \lg e \cdot \lg\left(\frac{D(x)}{(x_s - M(x))^2} + 1\right)$$

(здесь учтено, что $D(x - x_m) = D(x_s - x) = D(x)$, $M(x - x_m) = M(x) - x_m$, $M(x_s - x) = x_s - M(x)$).

Если $G(x_{ме})$ мало ($x_{ме} - x_m \ll x_s - x_{ме}$) или велико ($x_{ме} - x_m \gg x_s - x_{ме}$), то для соответствующего g -распределения найдем величину $D(g(x))$ по равенствам (53) и (56) соответственно (для промежуточных случаев необходимые формулы пока не выведены).

П.3 означает, что, несмотря на различные действия описанных трех моделей, результаты действия соответствующих им совокупностей F на одну величину ξ могут быть неразличимы. При необходимости решения обратной задачи — опознания действующей совокупности F по оценкам $p(x)$ — необходимы наблюдения величины x при разных ξ . Ниже будет разобран подробно общий вопрос о таких решениях, а сейчас остановимся на случае, когда используется формальная аппроксимация наблюдаемых данных описанными законами.

Взаимозаменяемость нормального, логнормального и g -нормального распределений при аппроксимации. Согласно п. 3 и следствию из него, логнормальное распределение величины $x - x_m$ с произвольными фиксированными параметрами x_m , x_{me} и $\sigma(\lg x)$ можно с какой угодно наперед заданной точностью аппроксимировать g -распределением, полагая в нем $x_s \rightarrow \infty$ и вычисляя остальные параметры по приводившимся правилам. Аналогичное утверждение справедливо относительно логнормального распределения величины $x_s - x$ с фиксированными параметрами x_s , x_{me} и $\sigma(\lg x)$ при $x_m \rightarrow -\infty$.

Нормальное же распределение величины x с произвольными фиксированными параметрами x_{me} и $\sigma(x)$ можно аппроксимировать с любой наперед заданной точностью логнормальным распределением величины $x - x_m$ с соответствующими параметрами при задании достаточно большого значения $x_{me} - x_m$ или логнормальным распределением величины $x_s - x$ при задании достаточно большого значения $x_s - x_{me}$, а также, в силу этого, — g -распределением величины x при задании одновременно достаточно больших значений $x_{me} - x_m$ и $x_s - x_{me}$. Величины параметров аппроксимирующего распределения могут быть найдены через величины параметров аппроксимируемого распределения по приведенным выше формулам. Нужно лишь учесть, что для применения выведенных формул зависимости между параметрами логнормальных и g -нормального распределений к условию $x_m \rightarrow -\infty$, $x_s \rightarrow \infty$ следует добавить, что величина $x_{me} - x_m$ должна существенно отличаться от $x_s - x_{me}$.

Если аппроксимируется произвольное распределение, то, согласно сказанному, оно может быть аппроксимировано логнормальным (обобщенным) распределением не хуже, чем нормальным, поскольку любое нормальное распределение может быть заменено логнормальным указанным способом, логнормальное же распределение не всегда может быть равноценно заменено нормальным (это можно видеть непосредственно: ни при каком изменении параметров нормальное распределение не может иметь существенную асимметрию, которая может быть свойственна логнормальному распределению; логнормальное же распределение при указанном выше подборе параметров теряет асимметрию, становясь подобным в этом отношении нормальному распределению). Аналогично получим, что любая аппроксимация может быть произведена g -распределением так же, как логнормальным, или даже лучше.

Вполне очевидно, что сказанное не зависит от того, что именно отображает аппроксимируемая функция (она может быть даже не статистической) и как производится оценка точности аппроксимации, т. е. что понимается под величиной расхождения ε^* между произвольной аппроксимирующей функцией $f(x)$ и аппроксимирующей ее функцией $p^*(x)$. В частности, под расхождением можно понимать $\varepsilon^* = \max |p^*(x) - f(x)|$, или $\varepsilon^* = \int_{-\infty}^{\infty} |p^*(x) - f(x)| \cdot dx$, или $\varepsilon^* = \int_{-\infty}^{\infty} (p^*(x) - f(x))^2 \cdot dx$ и т. д. Требуется лишь чтобы под ε^* понималось одно и то же выражение для разных сравниваемых $p^*(x)$. По определению, уменьшение ε^* означает увеличение (улучшение) точности аппроксимации.

Минимальные значения ε^* , получаемые при возможных значениях параметров в $p^*(x)$, обозначим ε_n^* , ε_{ln}^* и ε_g^* соответственно для случаев аппроксимации нормальным, логнормальным и g -нормальным распределениями. В число возможных значений параметров последних двух распределений включаются и предельные значения $x_m \rightarrow -\infty$, $x_s \rightarrow \infty$. Тогда доказанное выше может быть сформулировано кратко в следующем виде:

П. 4. При аппроксимации произвольной функции всегда $\varepsilon_g^* \leq \varepsilon_{ln}^* \leq \varepsilon_n^*$. Иными словами: при оптимальном подборе параметров точность аппроксимации g -распределением всегда не

ниже, чем логнормальным, а логнормальным — не ниже, чем нормальным.

На рис. 2 наглядно видно, что при не слишком большой дисперсии кривые g -распределения близки к кривым логнормального распределения величины $x-x_m$, если значение ξ (или x_{me}) относительно близко к x_m (кривые 1 и 5); логнормального распределения величины x_s-x , если значение ξ относительно близко к x_s (кривые 3 и 6); нормального распределения, если ξ достаточно далеко и от x_m и от x_s (кривые 2 и 7 — совпадающие, 4 и 8).

При построении этих кривых для простоты задавались параметры g -распределения и при том же ξ подбирались такие $\sigma(x)$, $\sigma(\lg x)$, $\sigma(\lg(1-x))$, чтобы величина $p(x)$ g -распределения была равна величине $p(x)$ соответствующего сравнимого распределения в точке $x=\xi$. Как видим, соответственно выражению (53), при значении $\xi=0,05$, относительно близком к x_m , величина $\sigma(g(x))=0,301 \approx 0,3$, принятая для

g -распределения, сравнительно мало отличается от $\sigma(\lg x)=0,2867 \approx 0,3$ близкого логнормального распределения. То же можно сказать и о $\sigma(g(x))$ и $\sigma(\lg(1-x))$ соответственно для g -распределения и логнормального распределения величины $1-x$ при значении $\xi=0,95$, близком к x_s . Связь же между параметрами кривых 2 и 7, 4 и 8 устанавливается через связь между параметрами нормального распределения и логнормального, а затем — логнормального и g -распределения.

Во избежание недоразумений подчеркнем, что п. 4 подразумевает подбор параметров аппроксимирующих распределений без ограничений, которые могут быть наложены на параметры, исходя из дополнительных соображений. В частности, как уже указывалось, при аппроксимации статистического распределения концентраций нормальным законом мы пренебрегаем тем, что он дает отличную от нуля вероятность отрицательных концентраций и концентраций, превышающих 100%, ради приближенного соответствия действительности основной части наблюдаемых значений. Аналогично для такой цели мы должны допустить и аппроксимацию g -распределением, не требуя, чтобы x_m и x_s обязательно были положительными и не превышающими 100%. В противном случае мы, удовлетворив физическому требованию, можем иногда получать аппроксимацию g -распределением по используемым формальным критериям хуже, чем нормальным и логнормальным законами.

Однако во многих случаях можно достичь достаточно хорошую аппроксимацию изучаемого фактического распределения g -распределением и по обычным статистическим критериям, пользуясь заведомо известными физически обоснованными значениями x_m и x_s .

Для примера на рис. 3 показана аппроксимация распределения CO_2 в рудах одного из редкометальных месторождений (по данным

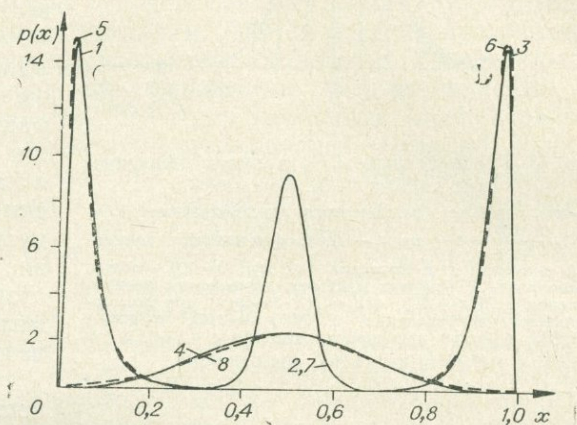


Рис. 2. Кривые $p(x)$ при различных распределениях. g -распределение при $\xi_m=0$, $\xi_s=1$ и параметрах: 1 — $\xi=0,05$, $\sigma(g(x))=0,301$ ($\approx \lg 2$); 2 — $\xi=0,5$, $\sigma(g(x))=0,075$; 3 — $\xi=0,95$, $\sigma(g(x))=0,301$; 4 — $\xi=0,5$, $\sigma(g(x))=0,301$. Логнормальное распределение величины x при параметрах: 5 — $\xi=0,05$, $\sigma(g(x))=0,2867$. Логнормальное распределение величины $(1-x)$ при параметрах: 6 — $\xi=0,95$, $\sigma(\lg(1-x))=0,2867$. Нормальное распределение при параметрах: 7 — $\xi=0,5$, $\sigma(x)=0,0431$; 8 — $\xi=0,5$, $\sigma(x)=0,1738$.

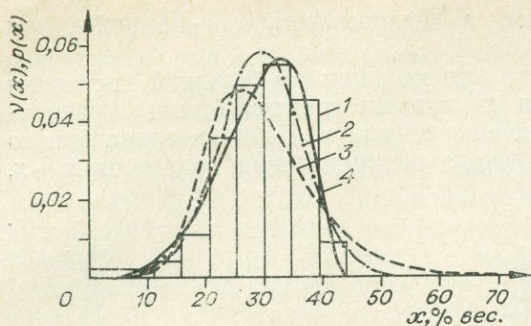


Рис. 3. Распределение CO_2 в рудах (фактические данные Г. И. Россмана).

1 — гистограмма фактического распределения CO_2 ;

$v(x) = \frac{n}{N(x_2 - x_1)}$ где n — число фактических попаданий значений x в интервал $(x_1; x_2)$, $N=101$ — общее число проб; 2 — кривая $p(x)$ при нормальном распределении с $M(x)=29,3$, $\sigma(x)=7,12$; 3 — $p(x)$ при логнормальном распределении с $M(\lg x)=1,43$, $\sigma(\lg x)=0,1335$; 4 — $p(x)$ при g -распределении с $x_m=0$, $x_s=44$, $M(g(x))=0,3407$, $\sigma(g(x))=0,349$.

химического анализа 101 пробы). Вполне очевидно, что $x_m=0$, так как редкометалльная руда в принципе может содержать как угодно мало CO_2 . Максимальная концентрация CO_2 достигается в чистом известняке, где, согласно химической формуле CaCO_3 , она равна 44%. В связи с ошибками измерений оценки концентрации достигали $x_s=54,1\%$. На основании этого различия в наблюдаемую оценку дисперсии введена поправка — такое пропорциональное уменьшение значений x , при котором x_s становится равным максимальной физически возможной величине (44%).

По критерию χ^2 вероятность наблюдаемых и больших

случайных отклонений фактического распределения от нормального составляет здесь $q=0,048$, для логнормального распределения величины $x-x_m$ при $x_m=0$ $q<0,001$, т. е. при традиционно используемом 5%-ном уровне значимости эти законы отвергаются. Для g -распределения $q=0,58$. Такое значение q считается обычно свидетельством очень хорошего согласия с фактическими данными.

Логнормальное распределение величины x_s-x при $x_s=44\%$ согласуется с фактическим примерно так же, как g -распределение, отличаясь главным образом физическим несоответствием, так как предполагает отличную от нуля вероятность отрицательных x , что в случае концентраций невозможно. Аналогичное явление наблюдалось и во всех других случаях изучения геологического материала: согласие фактического распределения с g -распределением было наилучшим, хотя иногда и мало отличалось от согласия с каким-либо другим из обсуждаемых теоретических распределений. Например, микроскопическим изучением 100 шлифов гранитов с вольфрамового месторождения Дедова гора (Восточное Забайкалье) было найдено, что нормальному, логнормальному (для x) и g -распределению соответствуют значения q : для кварца 0,262; 0,751 и 0,787; для полевых шпатов 0,678; 0,00250 и 0,83; для мусковита $<0,001$; 0,11 и 0,71.

Благоприятным для использования свойством g -распределения является возможность нахождения наиболее вероятных значений x_m и x_s (это удобно делать, в частности, с помощью метода максимального правдоподобия). Например, при изучении упомянутых шлифов были найдены оценки (в об. %): x_m — для кварца 10, полевых шпатов 16, для мусковита (априори) $x_m=0$; x_s — для кварца 82, полевых шпатов 67, мусковита 30. Это соответствует геологическим представлениям: при очень малых или очень больших концентрациях кварца и полевого шпата, а также очень больших концентрациях мусковита горная порода не является гранитом.

Следует отметить, что найденные таким образом значения x_m и x_s являются минимально и максимально возможными лишь для аппроксимирующего распределения. Фактический же размах наблюдаемых значений x , соответственно влиянию разных случайных факторов и ограниченности числа наблюдений, может быть как больше, так и меньше ширины найденного при аппроксимации интервала (x_m, x_s) .

Таким образом, использование g -распределения позволяет производить единообразную аппроксимацию в случаях и нормального, и логнормального (точнее, обобщенных логнормального и обратного логнормального), и бесчисленного множества промежуточных между ними распределений. По значениям же полученных оценок параметров можно судить о близости изучаемого фактического распределения к нормальному или логнормальному.

Далее мы основное внимание уделяем «малым» элементам — редким и рассеянным, а также цветным металлам. Для их концентраций значения x_{me} и $M(x)$ в геохимических пробах заведомо малы, обычно порядка 10^{-4} — $10^{-1}\%$. Здесь априори можно принять $x_m=0$, величина же x_s достигает нескольких процентов, десятков процентов (концентрации в собственных минералах) и даже 100% (самородные металлы). Таким образом, можно считать, что значения x_{me} и $M(x)$ здесь близки к x_m и далеки от x_s . В связи с известной заведомо редкой встречей высоких концентраций можно считать также, что здесь значение $\sigma(x)$ незначительно по сравнению с $x_s - M(x)$. Согласно п. 3, все это означает, что в таких случаях с относительно небольшими потерями качества можно применять для аппроксимации сравнительно простое логнормальное распределение x вместо g -распределения, что мы и будем делать, тем более, что это соответствует сложившимся представлениям. В будущем же, с ростом требований к точности обработки геохимических данных, необходимость в использовании g -распределения, очевидно, увеличится.

§ 3. ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ СВОЙСТВА И ПРИЗНАКИ СИММЕТРИЗУЮЩИХ ФУНКЦИЙ*

Используемые свойства. Применяя симметризирующие функции, можно во многих случаях существенно упростить исследование и повысить точность результатов. В частности, это можно использовать при оценке величины ξ по значениям x . Рассмотрим случай, когда выполняется условие независимости факторов F_i между собой и от величины ξ .

Как следует из формул § 1, 2, при фиксированном значении ξ для любой симметризирующей функции u имеем: $u(\xi) = M(u(x)) - M(\Delta u(x)) = u(x_{me}) - M(\Delta u(x))$. В случае нормального распределения $u(x)$ — тождественная функция: $u(x) = x$; при логнормальном и g -распределениях соответственно $u(x) = \lg x$ и $u(x) = g(x)$.

Поэтому при $M(\Delta u(x)) = 0$ (отсутствует систематическое смещение величин $\Delta u(x)$) оказывается $u(\xi) = u(x_{me})$, т. е. $\xi = x_{me}$. Тогда x_{me} является несмещенной оценкой для ξ . Все же другие оценки, не совпадающие с x_{me} , оказываются смещенными. В частности, при асимметричных распределениях смещенной по отношению к ξ оказывается величина $M(x)$: так, при логнормальном распределении, согласно формулам (18, 19, § 2), эта величина смещена по отношению к $x_{me} = \tilde{x}$, а следовательно, и по отношению к ξ , тем больше, чем больше ξ и дисперсия случайных отклонений. Таким образом, в отличие от смещения x_{me} величина смещения $M(x)$ от ξ при асимметричных распределениях зависит не только от постоянного для определенной совокупности F (систематического) смещения $\Delta u(x)$, но и от дисперсии случайных отклонений x от ξ и от величины ξ . Поэтому разность $M(x) - \xi$ здесь не является систематической.

Поясним это нагляднее: если систематическое смещение отсутствует, то при независимости факторов F_i между собой и от ξ отклонения x от ξ равновероятны в обе стороны. Поэтому тогда, по определению,

* Этот параграф служит главным образом для математического обоснования важных положений излагаемой далее теории ошибок и может быть опущен при чтении теми, кто не интересуется таким обоснованием.

ξ оказывается медианным значением. Если отклонения в обе стороны имеют и одинаковое математическое ожидание их абсолютной величины (что наблюдается при симметричном распределении), то с этим значением совпадает и $M(x)$. В противном случае $M(x)$ оказывается смещенным относительно ξ в ту сторону, где больше математическое ожидание абсолютной величины отклонения (при равной вероятности отклонений в обе стороны центр тяжести смещается в ту сторону, где больше средняя величина отклонений).

Сказанное означает, что все оценки для ξ , делаемые по ограниченному числу значений x и сходящиеся по вероятности к величинам, отличным от $x_{\text{ме}}$, являются всегда при обсуждаемых условиях, в том числе при $M(\Delta u(x)) = 0$, не только смещенными, но и несостоятельными, так как при увеличении числа значений x они отличаются от ξ на разную величину в зависимости и от ξ , и от $D(x)$.

Тем не менее, при практических исследованиях, когда число значений x конечно, часто в подобных случаях предпочитают оценивать ξ значением \bar{x} (средним арифметическим из x), сходящимся по вероятности к $M(x)$. Отчасти это объясняется тем, что оценка $M(x)$ по \bar{x} имеет более высокую точность, чем оценка $x_{\text{ме}}$ по обычно используемому для этого срединному значению (тому значению, которое находится в середине ряда значений x , расположенных в порядке неубывания).

Значение \bar{x} определяется более точно, поскольку при его вычислении учитываются не только одно или два смежных значения x в середине ряда (соответственно при нечетном или четном числе значений), но и величины всех x . Поэтому при симметричном распределении x эффективной оценкой ξ является \bar{x} . В частности, при нормальном распределении отношение дисперсии величины x к дисперсии срединного значения оказывается равным $2/\pi \approx 0,64$. Иначе говоря, точность оценки ξ по средней арифметической величине из 64 значений x равна точности оценки медианы по срединной величине из 100 значений x (Хальд, 1956). Поэтому, очевидно, и при небольшой асимметрии распределения x может оказаться более выгодной оценка ξ по \bar{x} .

Положение меняется, если воспользоваться тем, что для симметризирующих функций медианное значение и математическое ожидание совпадают, т. е. медианное значение может быть оценено также через среднее арифметическое. Но это означает, что, применяя функцию, обратную симметризирующей, можно получить оценку медианного значения для x :

$$x_{\text{ме}}^* = u^{-1}(\overline{u(x)}). \quad (1)$$

Она, по определению, сходится по вероятности к величине

$$x_{\text{ме}} = u^{-1}(M(u(x))), \quad (2)$$

т. е. обладает по сравнению с \bar{x} теми же преимуществами, что и величина $x_{\text{ме}}$ по сравнению с $M(x)$. В то же время она определяется через $u(x)$, следовательно, при ее вычислении учитываются все величины x . В частности, при симметричном распределении x величины \bar{x} и $x_{\text{ме}}^*$ полностью совпадают, как совпадают $M(x)$ и $x_{\text{ме}}$, а следовательно, и одинаково эффективны.

При практических исследованиях часто требуется указать достоверный интервал оценки измеряемой величины, т. е. интервал, в котором с определенной вероятностью может находиться измеряемая величина. Эта вероятность называется надежностью достоверного интервала.

Принято указывать достоверный интервал таким образом, чтобы при отсутствии систематического смещения оценки ξ соблюдалось

равенство $P(\xi \in (x^{(1)}, x_{\text{ме}}^*)) = P(\xi \in (x_{\text{ме}}^*, x^{(2)}))$, где $x_{\text{ме}}^*$ — оценка величины $x_{\text{ме}} = \xi$, $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ — соответственно левая и правая границы доверительного интервала. При симметричном распределении величины x такой доверительный интервал симметричен относительно совпадающих $x_{\text{ме}}^*$ и \bar{x} . В противном случае он асимметричен соответственно функции u .

Пусть

$$u_1 = u(x) - k \cdot \sigma(\Delta u(x)) \text{ и } u_2 = u(x) + k \cdot \sigma(\Delta u(x)) \quad (3)$$

— найденные для некоторого значения $u(x)$ границы доверительного интервала (u_1, u_2) , ширина которого, а следовательно, и надежность Λ , определяется величиной k (при нормальном распределении значений $\Delta u(x)$, как известно, $\Lambda = 0,68; 0,95; 0,997$ при $k = 1; 2; 3$ соответственно). Тогда границы соответствующего доверительного интервала (x_1, x_2) для $x = u^{-1}(u(x))$ при той же надежности Λ :

$$x_1 = u^{-1}(u_1), \quad x_2 = u^{-1}(u_2). \quad (4)$$

Найдем границы доверительного интервала той же надежности для $u(x)$. Согласно известной теореме о дисперсии среднего из независимых значений,

$$D(\overline{\Delta u(x)}) = \frac{1}{n} D(\Delta u(x)), \quad (5)$$

но при фиксированном ξ

$$D(u(x)) = D(u(\xi) + \Delta u(x)) = D(u(\xi)) + D(\Delta u(x)) = D(\Delta u(x)) \quad (6)$$

и аналогично $D(\overline{u(x)}) = D(\overline{\Delta u(x)})$. Поэтому, если значения x соответствуют одному значению ξ , то из (5) следует также:

$$D(\overline{u(x)}) = \frac{1}{n} D(u(x)), \quad (7)$$

откуда

$$\sigma(\overline{\Delta u(x)}) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sigma(\Delta u(x)) \quad (8)$$

и

$$\sigma(\overline{u(x)}) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sigma(u(x)). \quad (9)$$

Тогда границы доверительного интервала $(u_{1\text{ср}}, u_{2\text{ср}})$ надежности Λ для $\overline{u(x)}$ определяются выражениями

$$u_{1\text{ср}} = \overline{u(x)} - k \cdot \sigma(\overline{u(x)}) = \overline{u(x)} - \frac{k}{\sqrt{n}} \cdot \sigma(u(x)), \quad (10)$$

$$u_{2\text{ср}} = \overline{u(x)} + \frac{k}{\sqrt{n}} \cdot \sigma(u(x)).$$

Отсюда, в силу взаимной однозначности функции u , находим границы доверительного интервала (x_1, x_2) той же надежности Λ для $x_{\text{ме}}$:

$$x_{1\text{ме}} = u^{-1}(u_{1\text{ср}}), \quad x_{2\text{ме}} = u^{-1}(u_{2\text{ср}}). \quad (11)$$

Доверительные интервалы, границы которых определяются по формулам (10) и (11), будем для краткости называть доверительными интервалами $\pm \frac{k}{\sqrt{n}} \sigma$. Напомним, что определяемые через среднее абсолютное и вероятное отклонения доверительные интервалы

$\pm|\bar{\Delta}|$ и $\pm E$ имеют при нормальном распределении значений $\Delta u(x)$ надежность соответственно 0,576 и 0,5.

При рассмотрении статистических моделей в предыдущем параграфе указывалось, что распределения значений использовавшихся там симметризирующих функций имели величины $D(\Delta u(x))$, $\sigma(\Delta u(x))$ и $M(|\Delta u(x)|)$, не зависящие от ξ во всей области определения. В таких случаях эти величины являются параметрами распределений, определенным образом характеризующими действующую совокупность F , в то время как величины $D(\Delta x)$, $\sigma(\Delta x)$ и $M(\Delta x)$ могут зависеть не только от F , но и от ξ . В частности, при второй модели неизменность F означала одинаковую величину $\sigma(\Delta \lg x)$ при любом ξ , поскольку там величина $D(\Delta \lg x) = \sum_{i=1}^L \lg \delta_i$ зависит только от $\{\delta_i\}$, т. е. от операторов F_i , и не зависит от ξ . В то же время из-за увеличения Δx_i с увеличением ξ увеличивается и $\sigma(\Delta x)$. Таким образом, при всех этих моделях

$$K(\sigma(\Delta u(x)), \xi) = 0, K(|\Delta u(x)|, \xi) = 0.$$

Поскольку $u(x)$ — взаимно-однозначное отображение, то в последние два равенства вместо ξ может быть поставлена величина $u(\xi)$. Эти равенства не нарушаются и в том случае, если вместо значений ξ или $u(\xi)$ подставить другую положительно коррелированную с ними величину z , если z не коррелирована с $\Delta u(x)$. Поэтому для описанных моделей можно написать в более общей форме:

$$K(\sigma(\Delta u(x)), z) = 0, K(|\Delta u(x)|, z) = 0. \quad (12)$$

Независимость распределения $p(\Delta u(x))$ от ξ означает также, что

$$K(\Delta u(x), z) = 0. \quad (13)$$

Поскольку $u(x) = u(\xi) + \Delta u(x)$, то, согласно известной теореме о дисперсии суммы случайных величин,

$$D(u(x)) = D(u(\xi)) + D(\Delta u(x)) + 2K(\Delta u(x), u(\xi)).$$

Но, по равенству (13), в разбираемых случаях $K(\Delta u(x), u(\xi)) = 0$, т. е.

$$D(u(x)) = D(u(\xi)) + D(\Delta u(x)), \quad (14)$$

в то время как непосредственно для величин $x = \xi + \Delta x$

$$D(x) = D(\xi) + D(\Delta x) + 2K(\Delta x, \xi), \quad (15)$$

где величина $K(\Delta x, \xi)$ может быть не равной нулю. В частности, как уже упоминалось, во второй модели величины $\Delta \lg x$ не зависели от ξ и $u(\xi)$, в то время как величины Δx увеличивались с увеличением ξ , т. е. там $K(\Delta \lg x, \lg \xi) = 0$ при $K(\Delta x, \xi) > 0$.

Такая возможность взаимно-однозначного отображения пространства значений x с коррелированными величинами Δx и ξ на пространство значений $u(x)$ с некоррелированными величинами $\Delta u(x)$ и $u(\xi)$ существенно облегчает решение освещаемых ниже задач. В частности, облегчается решение обратной задачи: согласно (14), по $D(u(x))$ и $D(\Delta u(x))$ нетрудно найти

$$D(u(\xi)) = D(u(x)) - D(\Delta u(x)), \quad (16)$$

где, как было показано, для определенной совокупности F величина $D(\Delta u(x))$ оказывается постоянной, не зависящей от ξ . Зная $D(u(\xi))$, можно найти в случае необходимости и $D(\xi)$. Непосредственное же нахождение $D(\xi)$ из равенства (15) требует оперирования с величинами $D(\Delta x)$ и $K(\Delta x, \xi)$, которые могут быть сложными и труднонаходимыми функциями, зависящими и от F , и от ξ .

Класс всех функций, для которых справедливы равенства (2—4, 7—14, 16) при всех $\xi \in (\xi_m, \xi_s)$ или соответствующих $z \in (z_m, z_s)$, обозначим U_z . Согласно изложенному, для включений какой-либо функции $v(x)$ в этот класс на интервале (ξ_m, ξ_s) достаточно, чтобы она была симметризирующей при $\sigma(\Delta v(x)) = \text{const}(\xi)^*$ для всех $\xi \in (\xi_m, \xi_s)$.

Благодаря описанным свойствам, функции, входящие в U_z , весьма удобны для многих целей. О возможности нахождения таких функций можно судить по излагаемым ниже положениям. Далее будем считать, что все рассматриваемые функции непрерывны, взаимно-однозначны и дифференцируемы, причем их значения возрастают с увеличением аргумента. Последнее условие не нарушает общности, поскольку для любой удовлетворяющей остальным условиям функции, убывающей с увеличением аргумента, можно найти эквивалентную возрастающую.

Признаки симметризирующих функций. Для удобства дальнейших ссылок особо отметим два условия, которые могут налагаться на совокупность факторов $F = \{F_i\}$:

- 1) F_i не зависит от x'_{i-1} при любом возможном i ;
- 2) абсолютное изменение величины x , которое было бы произведено при воздействии одного любого фактора из $\{F_i\}$ непосредственно на ξ , мало по сравнению с суммой абсолютных величин изменений, которые произвели бы все остальные F_i . При этом с увеличением L оказывается $\frac{D(\Delta x'_i)}{D(\Delta x)} \rightarrow 0$ и $D(\Delta x) \rightarrow \infty$.

Далее для краткости второе условие будет иногда называться условием малости действия каждого из факторов F_i . Однако следует иметь в виду, что оно относится именно к воображаемому случаю непосредственного приложения F_i к ξ ; при действительном приложении F_i к x'_{i-1} изменение x может быть велико. В частности, во второй модели при $\delta_j > 1$ для всех j величина x'_i отличается от x'_{i-1} при прочих равных условиях тем больше, чем больше i : с увеличением i при этом растет x'_{i-1} , и умножение последней величины на δ_i приводит к большему абсолютному отличию x'_i от x'_{i-1} . Поэтому величина $|x'_i - x'_{i-1}|$ во второй модели при наложенном на $\{\delta_j\}$ условии статистически растет с увеличением i и может быть большой, несмотря на близость δ_i к 1.

При оговоренных в § 1 свойствах совокупности $F = \{F_i\}$ условие 1 означает, что последовательности значений

$$\xi = F_0(\xi), x'_1 = F'_1(\xi) = F_1(F_0(\xi)), x'_2 = F_2(x'_1) = F_2(F_1(F_0(\xi))), \dots$$

всегда можно поставить во взаимно-однозначное соответствие последовательность значений функции

$$v'_0 = v(\xi), v'_1 = v(x'_1) = v(\xi) + \Delta v'_1, v'_2 = v(x'_2) = v(\xi) + \Delta v'_1 + \Delta v'_2, \dots$$

(так, во второй модели последовательности значений $\xi, \xi \cdot \delta_1, \xi \cdot \delta_1 \cdot \delta_2, \dots$ была поставлена в соответствие последовательность $\lg \xi, \lg \xi + \Delta \lg x_1, \lg \xi + \Delta \lg x'_1 + \Delta \lg x'_2, \dots$), причем $v(x) = v(\xi) + \sum_{i=1}^L \Delta v'_i$, $\Delta v(x) = v(x) - v(\xi) = \sum_{i=1}^L \Delta v'_i$. При этом соблюдается условие:

1а) $\Delta v'_i = \Delta v(x'_i) = v(x'_i) - v(x'_{i-1})$ — величина, не зависящая от x'_{i-1} при любом возможном $i = 1, 2, \dots, L$.

Условие же 2 означает, что для каждой (непрерывной) функции v , в силу известного свойства непрерывных функций, соблюдается условие:

* То есть $\sigma(\Delta v(x))$ не зависит от ξ .

2а) для любого $i: |\Delta v'_i| \ll \sum_{j=1}^{i-1} |\Delta v'_j| + \sum_{j=i+1}^L |\Delta v'_j|$, причем с увеличением L оказывается $\frac{D(\Delta v'_i)}{D(\Delta v(x))} \rightarrow 0$ и $D(\Delta v(x)) \rightarrow \infty$.

Значения $v(x)$ здесь аналогичны значениям x в первом разделе § 2, т. е. они распределяются по свойственному первой модели симметричному асимптотически-нормальному закону. Следовательно, $v \in u_z$.

Таким образом, выполнение довольно общих условий 1 и 2 достаточно для существования симметризирующей функции (возможно, не единственной), входящей в U_z . В конце данного параграфа этот вывод будет получен и другим путем.

Для дальнейшего важно, что наличие функции v , удовлетворяющей условиям 1а и 2а, означает, что величины x являются результатами действия такой совокупности факторов, которая эквивалентна некоторой системе $F = \{F_i\}$ независимых факторов.

Рассмотрим положения, используемые далее при поисках функций, входящих в U_z по значениям $x, v(x), \Delta v(x)$.

В доказательствах указание очевидной области определения для краткости будем опускать. Для практических приложений отметим, что под (ξ_m, ξ_s) подразумевается любая часть интервала возможных значений ξ , выделяемая с целью облегчения аппроксимации изучаемого распределения по какому-то признаку. Чем шире промежутки (ξ_m, ξ_s) , тем более общими являются практические выводы, но тем труднее бывает найти нужный математический аппарат. Поэтому интервал возможных значений ξ может разбиваться на ряд таких промежутков.

Статистические параметры, относящиеся к распределению значений x при одном значении ξ , далее в необходимых случаях будем для удобства обозначать особо: $M(\Delta v(x)) | \xi$ означает математическое ожидание значений $\Delta v(x)$, относящихся к одному значению ξ , $v(x_{me}) | \xi$ означает медиану значений $v(x)$ при одном ξ и т. п.

Имеются характеристики распределений, которые по своей природе не могут относиться к одному значению. К ним принадлежит корреляционный момент.

В частности, по определению $K(\Delta v(x), v(\xi)) = M((\Delta v(x) - M(\Delta v(x))) \cdot (v(\xi) - M(v(\xi))))$. Наличие оператора математического ожидания величины ξ здесь означает, что величина K определяется для некоторого интервала, в пределах которого изменяется ξ , что обуславливает также изменение в соответствующих интервалах величин $v(\xi)$, $x, v(x)$ и $\Delta v(x)$. Можно говорить о величине $K(\Delta v(x), v(\xi))$ в точке ξ , подразумевая при этом определение $K(\Delta v(x), v(\xi))$ в ближайшей окрестности точки ξ — в бесконечно малом интервале, содержащем точку ξ . Тогда можно говорить и об изменении величины $K(\Delta v(x), v(\xi))$ с изменением ξ или $v(\xi)$.

Высказывание о том, что величина $K(\Delta v(x), v(\xi))$ имеет какую-то характеристику для всей области определения (промежутка (ξ_m, ξ_s)), означает, что она имеет эту характеристику для окрестностей любых точек ξ из этого промежутка.

Заметим, то неравенство $K(\Delta v(x), v(\xi)) > 0$, отражающее, по определению, статистический рост $\Delta v(x)$ с увеличением $v(\xi)$, означает увеличение $M(\Delta v(x)) | \xi$ с увеличением ξ . Аналогично: $K(\Delta v(x), v(\xi)) = 0$ означает независимость $M(\Delta v(x)) | \xi$ от ξ , т. е. тогда $M(\Delta v(x)) | \xi = M(\Delta v(x))$. $K(\Delta v(x), v(\xi)) < 0$ означает уменьшение $M(\Delta v(x)) | \xi$ с увеличением ξ . С другой стороны, направление изменения функции $M(\Delta v(x)) | \xi$ с изменением ξ определяет знак величины $K(M(\Delta v(x)) | \xi, \xi)$, и наоборот. Поэтому сказанное можно записать в следующем виде, удобном для дальнейшего использования:

$$\text{sign } K(\Delta v(x), v(\xi)) = \text{sign } K(\Delta v(x), \xi) = \text{sign } K(M(\Delta v(x)) | \xi, \xi), \quad (17)$$

где символ sign употреблен в том смысле, в каком он применяется в АЛГОЛ-60: он означает знак, причем знак величины, равной нулю, принимается также нулевым.

Как и ранее, здесь вместо ξ и $v(\xi)$ можно подставить положительно коррелированную с ними величину z .

Величина $M(\Delta v(x) | \xi)$ при отсутствии или исключении систематических изменений характеризует асимметрию закона $p(\Delta v(x))$. Действительно, в этом случае $M(\Delta v(x) | \xi)$ есть смещение величины $M(v(x))$ относительно медианы $x_{\text{ме}}$ значений x , наблюдаемых при этом значении ξ . Согласно известному определению, при положительном значении такого смещения закон $p(v(x) | \xi)$ и $p(\Delta v(x) | \xi)$ имеет положительную (правую) асимметрию, а при отрицательном — отрицательную (левую) асимметрию. Поэтому изменение $M(\Delta v(x) | \xi)$ с изменением ξ означает также изменение асимметрии закона $p(\Delta v(x))$. При этом, согласно сказанному выше и равенствам (17), величина $K(\Delta v(x), v(\xi))$ отлична от нуля. И наоборот: отличие от нуля величины $K(\Delta v(x), v(\xi))$ означает изменение асимметрии закона $p(\Delta v(x) | \xi)$ с изменением ξ . Такое явление мы видели в третьей модели: при изменении ξ от ξ_m до ξ_s асимметрия g -распределения менялась от максимальной правой до максимальной левой, причем в одной точке, при $\xi = 1/2 \cdot (\xi_m + \xi_s)$, распределение симметрично (асимметрия переходит через нуль). В этом случае, очевидно, для всего интервала (ξ_m, ξ_s) $K(\Delta v(x), v(\xi)) < 0$. Равенство же $K(\Delta v(x), v(\xi)) = 0$ может соблюдаться при неизменности асимметрии.

Отметим, что в общем случае равенство $K(\Delta v(x), v(\xi)) = 0$ не означает $K(|\Delta v(x)|, v(\xi)) = 0$: если a — произвольное число и события $\Delta v(x) = a$ и $\Delta v(x) = -a$ имеют при каждом ξ одинаковую плотность вероятности, то $M(\Delta v(x) | \xi) = 0$ как при отсутствии, так и при наличии изменения величины a с изменением ξ . Величина же $K(|\Delta v(x)|, v(\xi))$ при этом равна нулю только в случае $M(a | \xi) = \text{const}(\xi)$ и больше нуля или меньше его соответственно при увеличении или уменьшении a с увеличением ξ . Если же $K(|\Delta v(x)|, v(\xi)) = 0$, то обязательно и $K(\Delta v(x), v(\xi)) = 0$, что для рассматриваемых функций очевидно: при $K(\Delta v(x), v(\xi)) \neq 0$ величина $K(|\Delta v(x)|, v(\xi))$ также отлична от нуля, хотя знак ее может быть иным.

Мы будем рассматривать функции v , для которых равенство $K(|\Delta v(x)|, v(\xi)) = 0$ означает отсутствие какой бы то ни было зависимости между $\Delta v(x)$ и $v(\xi)$. В общем случае это не обязательно. Но, разумеется, отличие от нуля величины $K(|\Delta v(x)|, v(\xi))$ всегда свидетельствует о наличии связи между этими величинами (причинной или корреляционной через другие величины).

При всех экспериментальных исследованиях наблюдаемые распределения обусловлены факторами, связи между которыми определены не вполне детерминистически. Поэтому, мысленно выделяя случайную составляющую, можно считать, что в воздействии на ξ всегда принимает участие какая-то совокупность F независимых случайных факторов при $L \geq 2$. Если принять это во внимание, то определенность суждений о функциях $v(x)$ по $K(\Delta v(x), v(\xi))$ увеличивается.

Как было сказано в § 1, взаимная независимость факторов в $\{F_i\}$ означает также независимость их действия от ξ , т. е. сохранение формы и параметров соответствующих операторов при изменении ξ (величины же x_i при этом могут быть коррелированы с ξ , будучи зависимыми и от ξ , и от F_i). Но тогда условие 1а можно трактовать как отсутствие зависимости между $\Delta v(x)$ и ξ : поскольку $\Delta v(x) = \sum_{i=1}^L \Delta v'_i$, то в силу однотипности факторов F_i независимость $\Delta v'_i$ от ξ означает независимость от ξ и величины $\Delta v(x)$ (и наоборот). Следовательно, на основа-

нии центральной предельной теоремы можно принять следующую формулировку:

П. 5. Пусть x — результат действия на ξ совокупности F случайных факторов, подчиняющихся условию 2 (малости действия каждого из факторов). Тогда независимость $\Delta v(x)$ от ξ достаточна для того, чтобы распределение значений $v(x)|\xi$ (и $\Delta v(x)|\xi$) было асимптотически-нормальным при любом значении ξ . Независимость $\Delta v(x)$ от ξ означает, что для действующей совокупности F оказывается $\sigma(\Delta v(x)) = \text{const}(\xi)$. В совокупности с симметрией распределения $v(x)|\xi$, означающей, что функция $v(x)$ является симметризирующей, это означает, что при выполнении условий п. 5 функция $v(x)$ входит в класс U_2 .

Для тех случаев, когда независимость $\Delta v(x)$ от ξ взаимно-однозначно определяется равенством $K(|\Delta v(x)|, \xi) = 0$, положение 5 может быть усилено: тогда равенство $K(|\Delta v(x)|, \xi) = 0$ не только достаточно, но и необходимо для того, чтобы распределение значений $v(x)|\xi$ (и $\Delta v(x)|\xi$) было симметричным асимптотически-нормальным при любом ξ .

Достаточность этого условия для указанных случаев непосредственно следует из п. 5, и требуется доказать только необходимость. Однако мы приведем самостоятельное относительно подробное доказательство, использующее такие закономерности, учет которых помогает при анализе ряда положений, в том числе теории ошибок.

Пусть

$$K(|\Delta v'_i|, v(x'_{i-1})) = 0 \quad (18)$$

(в связи с однотипностью факторов F_i это равенство справедливо одновременно для всех i). Как было сказано выше, равенство $K(|\Delta v(x)|, v(\xi)) = 0$ невозможно, если $K(\Delta v(x), v(\xi)) \neq 0$. Аналогично этому, равенство (18) влечет соблюдение равенства $K(\Delta v'_i, v(x'_{i-1})) = 0$. Кроме того, согласно предыдущему, выражение (18) означает постоянство величины $M(|\Delta v'_i|/v(x'_{i-1}))$ (и соответствующей дисперсии) с изменением $v(x'_{i-1})$ при любом фиксированном значении i . Тогда величины $\Delta v'_i$ можно считать (при оговаривавшихся ограничениях) статистически не зависимыми от $v(x'_{i-1})$ и подчиняющимися условию 1а. С другой стороны, если выполняется условие 2 для F , то, как упоминалось, в силу непрерывности v выполняется и условие 2а. Следовательно, удовлетворяются оба условия центральной предельной теоремы, и распределение величин $\Delta v(x)|\xi$ симметрично (асимптотически-нормально) для любого ξ .

Справедливо и обратное положение: если распределение величин $\Delta v(x)|\xi$ симметрично для любого ξ , то выполняется равенство (18). Это легко доказать от противного: несправедливость равенства (18) приводит обязательно к асимметрии распределения величин $\Delta v(x)|\xi$. Допустим, например, что

$$K(|\Delta v'_i|, v(x'_{i-1})) > 0. \quad (19)$$

Это явление может быть при $K(\Delta v'_i, v(x'_{i-1})) > 0$ и при $K(-\Delta v'_i, v(x'_{i-1})) > 0$. Рассмотрим вначале первый из этих вариантов, т. е. что выражение (19) связано с неравенством

$$K(\Delta v'_i, v(x'_{i-1})) > 0. \quad (19a)$$

Фактор F_1 при воздействии на одно значение ξ может приводить к различным распределениям значений $v(x_1)$; поэтому воздействию F_2 подвергаются уже разные, статистически распределенные, значения x_1 , т. е. на распределение результатов воздействия F_2 при фиксирован-

ном ξ начинает влиять тенденция, выражаемая неравенством (19а): чем больше $v(x'_{i-1})$, тем больше отклоняется $v(x'_i)$ от $v(x'_{i-1})$, преимущественно вправо. С ростом i дисперсия значений $v(x)$, которая была бы вызвана действием фактора F_i на одно подверженное ему исходное значение, становится малой по сравнению с дисперсией исходных значений, вызванной всеми предыдущими факторами. Тогда асимметрия распределения значений $v(x'_i)|\xi$ меньше зависит от индивидуальных особенностей F_i и все больше определяется общей характеристикой — знаком величины $K(\Delta v'_i, v(x'_{i-1}))$, т. е. при выполнении условия 2а это приводит к правоасимметричному распределению значений $v(x)|\xi$ (а следовательно, и $\Delta v(x)|\xi$) при любом распределении отдельных значений $\Delta v(x'_i)|x'_{i-1}$. В связи с возрастанием Δv_i с увеличением $v(x'_{i-1})$ и ростом $v(x'_{i-1})$ по мере увеличения ξ асимметрия распределения значений $\Delta v(x)|\xi$ может меняться по величине с изменением ξ .

Аналогично доказывается асимметрия распределения значений $\Delta v(x)|\xi$ при обусловленности неравенства (19) неравенством $K(-\Delta v'_i, v(x'_{i-1})) > 0$, а также при $K(|\Delta v'_i|, v(x'_{i-1})) < 0$.

Таким образом, в силу справедливости названных прямых и обратных положений, равенство (18) необходимо и достаточно для того, чтобы распределение значений $\Delta v(x)$ было симметричным асимптотически-нормальным.

В то же время равенство (18) эквивалентно равенству

$$K(|\Delta v(x)|, v(\xi)) = 0. \quad (20)$$

Действительно: вполне очевидно, что из равенства (18) следует равенство (20). Если же $K(|\Delta v'_{i-1}|, v(x'_{i-1}))$ больше или меньше нуля для всех i , то по тем же соображениям обязательно больше или соответственно меньше нуля и величина $K(|\Delta v(x)|, v(\xi))$. Следовательно, выполнение равенства (20) возможно только при выполнении равенства (18). Таким образом, эти равенства эквивалентны, и то, что было доказано для условия (18), справедливо для (20), т. е. формулировка усиленного п. 5 доказана.

Учтем для дальнейшего, что если формула (20) определена для $\xi \in (\xi_m, \xi_s)$ и $v(\xi) \in (v(\xi_m), v(\xi_s))$, то формула (18) определена для $v(x'_{i-1}) \in (v(\xi_m) - A_{Lv}(\xi_m), v(\xi_s) + A_{Lv}(\xi_s))$, где $A_{Lv}(\xi_m)$ — максимально возможное абсолютное отклонение величины $v(x'_{i-1})$ от $v(\xi)$ в сторону занижения при $\xi = \xi_m$, а $A_{Lv}(\xi_s)$ — максимально возможное абсолютное отклонение $v(x'_{i-1})$ от $v(\xi)$ в сторону завышения при $\xi = \xi_s$. Когда $\xi_m \rightarrow \xi_s$ (промежуток (ξ_m, ξ_s) стягивается в одну точку), то можно говорить о справедливости формулы (20) лишь в окрестности точки ξ , т. е. о корреляции $|\Delta v(x)|$ и $v(\xi)$ при переходе через определенное значение $v(\xi)$. Для формулы же (18) при $A_{Lv}(\xi_m), A_{Lv}(\xi_s) > 0$ область определения и тогда остается отличной от нуля — это промежуток $(v(\xi) - A_{Lv}(\xi), v(\xi) + A_{Lv}(\xi))$, где в данном случае, при симметричном распределении, $A_{Lv}(\xi_m) = A_{Lv}(\xi_s) = A_{Lv}(\xi)$.

Отметим также, что наложение на функции $v(x)$ ограничений, обусловливающих эквивалентность равенства $K(|\Delta v(x)|, v(\xi)) = 0$ высказыванию о независимости $\Delta v(x)$ и $v(\xi)$, используется лишь в той части усиленного п. 5, которая относится к условию достаточности: если $K(|\Delta v(x)|, v(\xi)) \neq 0$, то величины $\Delta v(x)$ и $v(x)$ обязательно являются зависимыми. Поэтому условие необходимости в этой теореме не связано с ограничениями на v .

Если величина $K(|\Delta v'_i|, v(x'_{i-1}))$ больше (меньше) нуля, то, как было указано, растет (уменьшается) с ростом $v(x'_{i-1})$ величина $M(|\Delta v'_i|)|v(x'_{i-1})$, т. е. с ростом $v(x'_{i-1})$ увеличивается (уменьшается) дисперсия

значений $\Delta v_i'$ относительно $v(x'_{i-1})$. При непрерывном распределении значений $v(x'_{i-1})|\xi$ это означает изменение асимметрии (неравномерное растяжение по оси абсцисс) при переходе от распределения значений $v(x'_{i-1})$ к распределению значений $v(x'_i)$ при том же значении ξ .

На практике нередки случаи, когда малость действия каждого из факторов F_i в отдельности априори не гарантируется. В таких случаях нельзя использовать положения об асимптотически-нормальном распределении значений $v(x)$, но все же можно рассматривать вопрос о принадлежности v к классу U_z . Эта возможность обусловливается следующим образом.

Поскольку нет полной детерминистически определенной связи между случайными факторами F_i и результатами их действия, то полная компенсация влияния каждого из них на величину x имеет нулевую вероятность. Поэтому достаточно наличия в F хотя бы двух факторов, для которых $K(|\Delta v_i|, v(x'_{i-1})) = 0$, чтобы асимметрия закона $p(\Delta v(x)|\xi$ менялась с изменением ξ . Заметим, что одного фактора в F для этого недостаточно: можно представить фактор, для которого при изменении $M(|\Delta v_i|)|\xi$ с изменением ξ одинаковы плотности вероятностей появления равных по абсолютной величине положительных и отрицательных значений $\Delta v_i'$. Тогда закон $p(\Delta v(x)|\xi$ симметричен, но $K(|\Delta v(x)|, v(\xi)) \neq 0$. Наложение же двух таких факторов, как видно из рассуждений, приводившихся для усиления п. 5, приводит к появлению и изменению асимметрии распределения $p(\Delta v(x)|\xi$ с изменением ξ . Тогда сохранение симметричности закона $p(\Delta v(x)|\xi$ с изменением ξ возможно только при $K(|\Delta v_i|, v(x'_{i-1})) = 0$ для факторов этой совокупности F , т. е. при $K(|\Delta v(x)|, v(\xi)) = 0$. Это означает справедливость следующего положения:

П. 5а. Пусть x — результат действия на ξ совокупности двух или более факторов, связи между которыми имеют случайную составляющую (не полностью детерминистически определены). Тогда необходимым условием для распределения значений $\Delta v(x)|\xi$ по симметричному (но не обязательно асимптотически-нормальному) закону для всех ξ из промежутка отличной от нуля ширины является равенство $K(|\Delta v(x)|, v(\xi)) = 0$. При $K(|\Delta v(x)|, v(\xi)) \neq 0$ закон $p(\Delta v(x)|\xi$ может быть симметричным лишь в отдельных точках ξ , в которых асимметрия, изменяясь, переходит через нулевое значение.

Названное условие является необходимым, но не достаточным: здесь допускается, что значительная часть величины Δv может быть обусловлена действием на ξ малого числа факторов. Если каждый из этих факторов в отдельности давал бы распределение $p(\Delta v)|\xi$ с существенной асимметрией, одинаковой для всех ξ , то и в результате совместного их действия образовалось бы распределение $p(\Delta v)|\xi$ с асимметрией, одинаковой для разных ξ .

Для дальнейшего важно, что справедливость п. 5а не ограничивается случаем большого числа действующих случайных факторов и малостью действия каждого из них, как это требовалось для п. 5.

Отметим, что при отсутствии полной детерминистической определенности связей в $\{F_i\}$ для распределения $\Delta v(x)$ по нормальному закону условие 1а является необходимым, т. е. $K(|\Delta v_i|, v(x'_{i-1})) = 0$ для всех i при $v(x'_{i-1}) \in (v(\xi) - A_{Lv}(\xi), v(\xi) + A_{Lv}(\xi))$, а следовательно, и для всех $v(x'_{i-1}) \in (-\infty, \infty)$, поскольку при нормальном распределении возможны сколь угодно большие значения $|\Delta v|$, т. е. $A_{Lv}(\xi) = \infty$. Иными словами, нормальное распределение значений $\Delta v(x)|\xi$ возможно только в случае, если действие любого i -го случайного фактора на

величину $v(x'_{i-1})$ не зависит от нее (в указанном корреляционном отношении) на всей числовой оси. Следовательно, для образования нормального распределения $p(\Delta v(x)|\xi)$ при одном фиксированном значении ξ необходимо одинаковое проявление действия совокупности $\{F_i\}$ на всей числовой оси. Напомним, что это невозможно для концентраций, так как их значения не могут выходить за определенный ограниченный участок числовой оси.

Для использования строгих нормализующих преобразований важно то, что, найдя такое преобразование для одного значения ξ , мы тем самым находим его для всех возможных значений ξ . Действительно, как уже было показано выше, параметры нормального распределения не зависят от ξ . Это означает справедливость положения:

Если x — результат действия на ξ совокупности случайных факторов и $p(\Delta v(x)|\xi)$ — нормальный закон с дисперсией $D(\Delta v(x))$ при каком-то одном значении ξ , то при любых других значениях ξ закон $p(\Delta v(x)|\xi)$ также нормален и имеет ту же дисперсию $D(\Delta v(x))$.

Для суждения же о неизменности других законов с изменением ξ , т. е. о принадлежности их к U_z , в случаях ограниченности соответствующих им величин A_{Lv} при обычной для практики ограниченности числа значений ξ , для которых проведены исследования формы изучаемого распределения $p(\Delta v(x)|\xi)$, можно использовать следующее положение:

П. 6. Пусть x — результат действия на ξ совокупности двух или более факторов, связи между которыми имеют случайную составляющую (не полностью детерминистически определены); $\xi_0, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ — значения ξ из промежутка (ξ_m, ξ_s) , выбранные без учета формы закона $p(\Delta v(x)|\xi)$; $A_{Lv}(\xi_j)$ — максимально возможное абсолютное отклонение значения $v(x)|\xi_j$ от $v(\xi_j)$. Тогда, если распределение $p(\Delta v(x)|\xi)$ симметрично при всех $\xi \in \{\xi_j\}$ и если промежуток $(v(\xi_m), v(\xi_s))$ полностью перекрывается промежутками $(v(\xi_j) - A_{Lv}(\xi_j), v(\xi_j) + A_{Lv}(\xi_j))$, $j=0, 1, 2, \dots, n$, то $v(x) \in U_z$ за возможным исключением случаев из множества меры нуль.

Доказательство. Симметричность распределения значений $\Delta v(x)|\xi$ для любой точки $\xi \in \{\xi_j\}$ означает справедливость равенства (20) для этой точки. Действительно, согласно п. 5а, при несоблюдении равенства (20) распределение значений $\Delta v(x)|\xi$ (закон $p(\Delta v(x)|\xi)$) может быть симметричным лишь для точек ξ , в которых меняется знак асимметрии. Поскольку точки $\{\xi_j\}$ выбираются без учета симметрии, то совпадение их с точками изменения знака симметрии имеет нулевую вероятность, т. е., по принятой терминологии, множество случаев такого совпадения имеет меру нуль (практически этими случаями можно пренебречь). Но тогда справедливо и эквивалентное выражению (20) равенство (18) для области $v(x'_{i-1}) \in (v(\xi) - A_{Lv}(\xi), v(\xi) + A_{Lv}(\xi))$, т. е. в указанной области можно считать значения Δv_i независимыми от $v(x'_{i-1})$. Если такие области перекрывают весь промежуток $(v(\xi_m), v(\xi_s))$, то значения Δv_i не зависят от $v(x'_{i-1})$ во всем этом промежутке. Следовательно, тогда распределение $p(\Delta v|\xi)$ одинаково для всех $\xi \in (\xi_m, \xi_s)$ (симметрично и имеет величину $\sigma(\Delta v(x))$, не зависящую от ξ), а это означает, что $v(x) \in U_z$ (за исключением указанных выше случаев из множества меры нуль) что и требовалось доказать. Разумеется, при этом и $A_{Lv}(\xi) = \text{const}(\xi)$.

Для поиска функций, входящих в U_z , можно использовать уже известный аппарат преобразующих функций. В частности, относительно хорошо изучены преобразования законов распределения к нормальному виду (Большев, 1967; Poleck, 1967; и др.).

Поэтому представляется оправданным широкое использование функций из U_z в дальнейшем изложении. Часто мы будем полагать их не только симметризирующими, но и нормализующими. Это допустимо в связи с известной принципиальной возможностью преобразования многих распределений к нормальному закону. Некоторое усложнение по сравнению с ранее принятыми в литературе требованиями вносит выявленная выше необходимость получения распределений с величинами D (или σ , $|\bar{\Delta}|$), сохраняющими постоянство с изменением ξ в области определения. Но такое усложнение не является существенным: если имеется зависимость этих величин при постоянстве формы распределения, то такую зависимость можно устранить простым дополнительным преобразованием («сжатием» или «растяжением» функции плотности вероятности по оси ξ так, чтобы параметр σ оставался постоянным).

Для практических целей может быть использована аппроксимация с поиском функций, приближенно удовлетворяющих поставленным требованиям и различных для разных частей фактического интервала значений изучаемых величин. При этом следует помнить, что при выборе функции $v(x)$, предпочтительно входящей в класс U_z , для описания наблюдаемого распределения при невозможности совершенно точного его выражения необходима раздельная проверка этой функции как по симметричности распределения $p(v(x))|\xi$, так и по неизменности его дисперсии (с необходимым приближением) для разных ξ .

Напомним, что такая проверка позволяет получить одновременно представление о механизме действия F , так как изменение дисперсии с изменением ξ может быть использовано для отнесения наблюдаемого распределения к одному из законов, мало отличающихся по форме, но резко различных по природе. В частности, как было показано в предыдущем параграфе, нормальное и логнормальное распределения могут практически не различаться при небольшой величине отношения $\sigma(\Delta x)/x_{\text{ме}}$. Изменение же ξ (а следовательно, и $x_{\text{ме}}$) при нормальном распределении, обусловленном действием первой модели, оставляет неизменной величину $\sigma(\Delta x)|\xi$ и меняет $\sigma(\Delta \lg x)|\xi$. При логнормальном распределении, обусловленном действием второй модели, наоборот, изменяется $\sigma(\Delta x)$ и остается неизменной $\sigma(\Delta \lg x)$.

Пример. Для различных частей одного из интрузивных комплексов Забайкалья была установлена непротиворечивость статистических распределений концентраций олова по принятым критериям согласия как нормальному, так и логнормальному законам. Но при этом оказалось, что дисперсии концентраций существенно растут с увеличением средних (по соответствующей части комплекса) концентраций, дисперсии же логарифмов концентраций при этом не проявляют столь четкой тенденции к изменению.

В таком случае, согласно приведенным положениям, вторая статистическая модель более предпочтительна, чем первая, для описания процессов, обусловивших наблюдаемые закономерности, и статистическую обработку данных при прочих равных условиях целесообразнее вести, исходя из предположения приближенного описания распределения концентраций олова не по нормальному, а по логнормальному закону.

§ 4. АППРОКСИМАЦИЯ ПРОИЗВОЛЬНЫХ ЗАКОНОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Выше мы затрагивали вопросы аппроксимации наблюдаемых статистических распределений теоретическими в простейших случаях, когда выбираемые теоретические законы имеют априори фиксированное число параметров и должны иметь наименьшее (из возможных при та-

ком подходе) отклонение от наблюдаемых распределений без специального отделения какой-либо их составляющей. При геохимических же исследованиях часто приходится иметь дело с более сложными ситуациями, в частности с полимодальными распределениями наблюдаемых концентраций при неопределенно большом числе параметров. В связи с конкретными целями исследований требуется выделение соответствующих им полезных сигналов и уменьшение влияния помех (ошибок измерений и природных флуктуаций поля, связанных с мешающими объектами), т. е. отделение определенной составляющей. Кроме того, главной целью геохимии является изучение не статистического, а пространственного распределения концентраций, которое отражает местоположение искоемых и изучаемых объектов, в том числе месторождений полезных ископаемых. Такие задачи требуют более сложного подхода, чему и посвящен данный параграф.

Пусть $\varphi = \varphi(r)$ — функция, описывающая изучаемое явление, о которой известно, что она принимает значения из определенного множества (пространства) Φ , когда ее аргумент (в общем случае многомерный) принимает значения из множества (пространства) R , априорные же сведения о параметрах и (или) форме этой функции неполны.

Через $f = f(r)$ обозначим результаты наблюдений изучаемого явления, зависящие от $\varphi(r)$ и от действия каких-то неполностью известных (случайных) факторов, которые могут меняться в пространстве и времени. Рассмотрим случаи, когда значения f принадлежат тому же множеству Φ , что и значения φ .

При названных условиях точное суждение о функции $\varphi(r)$ по значениям $f(r)$ невозможно, и встает задача о приближенном представлении ее в виде какой-то функции $\varphi^* = \varphi^*(r)$, по возможности наиболее близкой к ней (в определенном смысле) и принимающей значения из того же множества Φ . Функции φ и φ^* будем называть соответственно аппроксимируемой и аппроксимирующей.

Вопросом аппроксимации посвящена довольно обширная литература, в которой видное место занимают работы (Колмогоров, 1941; Wiener, 1949). Описанные в них методы высокоэффективны, когда известны спектры помех и выделяемых изменений поля.

Следующим по эффективности, применимым при неполной информации о спектрах различных составляющих поля, является метод наименьших квадратов с выбором оптимального порядка используемого полинома по принятым критериям согласия (Линник, 1962; Худсон, 1967; Kendall, 1948).

Однако распространенные критерии согласия, строго говоря, справедливы лишь в случаях, когда отклонения фактического распределения от теоретического заведомо подчиняются определенному закону (например, χ^2). Для использования таких широко употребительных критериев, как χ^2 , требуется группирование исходных данных, которое приводит к некоторой потере информации, не вполне строго обосновывается и может приводить к различным результатам для одной и той же совокупности данных; известные же критерии типа ω^2 , не требующие группирования, относительно сложны (Смирнов, Дунин-Барковский, 1965). Следует также учитывать, что получаемые с помощью критериев согласия выводы о противоречивости или непротиворечивости теоретического закона фактическим данным довольно условны. Действительно, поскольку природные явления бесконечно сложны, то при достаточном увеличении числа наблюдений, т. е. при достаточном возрастании точности выводов, природное распределение изучаемых величин наверняка должно значимо отличаться от любого заранее выбранного теоретического закона конечной сложности. С другой стороны, противоречие такому закону по какому-либо критерию согласия еще не означает, что

при определенных условиях этот закон невыгодно использовать для приближенного описания изучаемых явлений.

Многие авторы считают, что выбор оптимальной сглаживающей функции по широко известным критериям согласия применим лишь для относительно простых случаев (Романенко, Сергеев, 1968), и ведется поиск иного подхода. В частности, в работе (Демидович, 1967), где рассматривается аппроксимация параболлами (простыми алгебраическими полиномами), предлагается принимать порядок аппроксимирующей параболлы наименьшим из тех, при которых среднее отклонение значений f от φ^* относительно резко падает по сравнению со случаями парабол меньшего порядка. При этом не учитываются конкретные цели аппроксимации и приходится пользоваться субъективным представлением о том, какое изменение падения указанного отклонения следует считать достаточно резким.

Привлекают внимание методы аппроксимации, основанные на представлениях о некоторой требуемой гладкости функции φ в зависимости от изменчивости поля значений f (Ланцош, 1961; Линник, Хусу, 1958; Ястремский, 1967). Эта изменчивость может оцениваться по средней величине разностей значений поля в соседних точках их наблюдений или в точках, разделенных некоторым числом других точек наблюдений. Такой подход использован при описании распределения вещества в рудных телах трендом концентраций (Четвериков, 1968). Здесь требуется еще объективизация выбора величины той части изменчивости, которая должна быть сглажена. Аналогичные затруднения были встречены при развитии и других известных способов аппроксимации.

Особенно слабо разработанным оказался вопрос о выборе аппроксимирующей функции в случае, когда меняется не только число параметров в ней, но и ее вид, определяемый различными физическими представлениями о механизме формирования наблюдаемого поля. В таких случаях необходимый выбор производится обычно по интуиции или на основании различных особых доказательств без единого алгоритма. Ниже рассматривается единое алгоритмическое решение этого вопроса для довольно распространенных случаев.

Решение основывается на следующем положении. Аппроксимация какого-либо объекта (предмета, оператора, функционала, функции) означает использование вместо него другого объекта, близкого к аппроксимируемому по тем свойствам, которые важны с точки зрения решаемой задачи. Близость же по свойствам определяется расстоянием в функциональном пространстве. Поэтому в качестве наилучшего аппроксимирующего объекта следует взять тот, для которого это расстояние от аппроксимируемого объекта является наименьшим. Если же конкретный аппроксимируемый объект неизвестен, то, очевидно, нужно выбирать аппроксимирующий объект по минимуму математического ожидания названного расстояния. Эта величина, в свою очередь, тем меньше, чем меньше математическое ожидание отличия наблюдаемых признаков аппроксимирующего и аппроксимируемого объектов. Отсюда, используя более строгий язык, мы приходим к следующим выражениям, позволяющим, как будет показано далее, решить поставленные задачи.

Пусть φ , φ_1^* и φ_2^* — какие-то объекты (предметы, функции, функционалы или операторы) — точки в функциональном пространстве F ; $q_\varphi = q(\varphi)$, $q_1^* = q(\varphi_1^*)$, $q_2^* = q(\varphi_2^*)$ — соответствующие им признаки (свойства, характеристики) — точки в пространстве Q признаков, которое может быть многомерным; L_F и L_Q — операторы вычисления расстояний соответственно в пространствах F и Q . Тогда при любых (принятых в функциональном анализе) определениях расстояний, в том числе различных для L_Q и L_F , и при прочих равных условиях, если

то

$$\left. \begin{aligned} M(L_Q(q_1^*, q_\Phi)) &< M(L_Q(q_2^*, q_\Phi)), \\ M(L_F(\Phi_1^*, \Phi)) &< M(L_F(\Phi_2^*, \Phi)). \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Величины математических ожиданий $M(L_Q(q_1^*, q_\Phi))$ и $M(L_Q(q_2^*, q_\Phi))$ могут быть оценены при незнании конкретных свойств q_Φ , q_1^* , q_2^* по вероятностям или плотностям вероятностей различных их значений*. Если же q_Φ , q_1^* , q_2^* заведомо известны, фиксированы и могут быть подсчитаны конкретные величины $L_Q(q_1^*, q_\Phi)$ и $L_Q(q_2^*, q_\Phi)$, то согласно свойству математического ожидания фиксированной величины $M(L_Q(q_{\Phi_1}^*, q_\Phi)) = L_Q(q_1^*, q_\Phi)$, $M(L_Q(q_{\Phi_2}^*, q_\Phi)) = L_Q(q_2^*, q_\Phi)$, и выражение (1) приобретает вид:

$$\text{если } L_Q(q_1^*, q_\Phi) < L_Q(q_2^*, q_\Phi), \text{ то } M(L_F(\Phi_1^*, \Phi)) < M(L_F(\Phi_2^*, \Phi)). \quad (1a)$$

При сравнении различных пар имеющихся или известных объектов Φ_k^* выражения (1) и (1a) позволяют выбрать из них такие, которые по своим свойствам могут быть лучше использованы в качестве нужного (известного или неизвестного) объекта Φ . Важно, что среди объектов Φ_k^* может не быть при этом ни одного тождественного объекту Φ .

Это положение можно выразить менее строгим языком таким образом: математическое ожидание отличия от нужного объекта Φ меньше для того из рассматриваемых объектов Φ_k^* , который при прочих равных условиях имеет признаки, более близкие к признакам объекта Φ при различных принятых способах определения такого отличия и близости.

Сформулированное положение мы примем как аксиому для рассматриваемых нами случаев аппроксимации. Заметим, что интуитивно, без формулировки, оно фактически используется и в науке, и в технике, и в обыденной жизни: если мы не знаем характеристик, однозначно определяющих искомые объекты, то пользуемся для поиска хотя бы известными свойствами. При этом мы можем ошибаться в отдельных случаях, но знаем, что математическое ожидание ошибки, отображаемое величиной $M(L_F(\Phi_k^*, \Phi))$, при этом должно быть меньше, чем в случае пренебрежения такими свойствами. В частности, искомыми объектами могут быть рудные месторождения, как можно более крупные, а их признаками — продуктивности вторичных геохимических ореолов. Если другие признаки не известны, то при прочих равных условиях лучше направить разведку на ореолы большей продуктивности, хотя мы знаем, что в каких-то априори не известных нам случаях может оказаться, что ореолу с меньшей продуктивностью соответствует более крупное месторождение.

Полученное в результате обобщения и формализации описания таких ситуаций положение о связи между $L_Q(q^*, q_\Phi)$ и $L_F(\Phi_k^*, \Phi)$ послужило основой для разработки описываемых ниже новых способов аппроксимации. Поэтому мы будем называть его кратко для удобства ссылок основным положением аппроксимации.

Согласно этому положению, при недостатке информации о нужном объекте Φ и (или) отсутствии его среди имеющихся объектов Φ_k^* оптимальным (априори) для использования в качестве (или вместо) Φ является тот из Φ_k^* , для которого минимально $M(L_F(\Phi_k^*, \Phi))$. Минимизация величины $M(L_F(\Phi_k^*, \Phi))$ означает в таких случаях и оптимальность алгоритма выбора Φ_k^* , причем выбор может производиться при необходимости по любому признаку q_k^* , меняющемуся с изменением Φ_k^* . По-

* Вместо математических ожиданий аналогично могут быть использованы и другие положительно коррелированные с ними величины.

скольку, согласно (1), $M(L_F(q_k^*, \varphi))$ имеет минимальное значение для того объекта φ_k^* , у которого минимальна величина $M(L_Q(q_k^*, q_\varphi))$, то основное положение аппроксимации можно сформулировать следующим, удобным для последующих выкладок, образом:

В качестве оптимального аппроксимирующего объекта из числа рассматриваемых φ_k^* , при прочих равных условиях, должен быть выбран такой, для которого минимальна величина $M(L_Q(q_k^*, q_\varphi))$ (или величина $L_Q(q_k^*, q_\varphi)$, если она имеет единственное значение).

Следовательно, величина $M(L_Q(q_k^*, q_\varphi))$ или другие связанные с нею величины могут служить критериями аппроксимации. Важно, что при этом могут использоваться, хотя и с разной эффективностью, любые признаки (свойства, характеристики) q , меняющиеся при изменении характеризуемых ими объектов.

Алгоритм аппроксимации первого ранга

Так назовем алгоритм аппроксимации, когда задан вид (формула) функции $\varphi^*(r)$ и требуется найти лишь значения ее параметров.

Пусть для совокупности точек $\{r_k\}_{k=1}^n$ известны значения $f_k = f(r_k)$ или, иначе говоря, задана совокупность точек $\{r_k, f_k\}_{k=1}^n$.*

Вначале рассмотрим случай, когда требуется провести аппроксимацию при отсутствии сведений о законе распределения конечного множества значений $f(r_k)$ относительно $\varphi(r_k)$, причем по каким-либо причинам мы можем сравнивать только значения $f(r_k)$, относящиеся к точкам r_k , разделенным расстояниями $R \geq R_0$ (последнее условие понадобится нам для фактических вычислений только начиная со следующего алгоритма; здесь оно не уменьшает общности задачи, поскольку его отсутствие представляется как $R_0 = 0$ и введено для упрощения последующих построений). R_0 может определяться по-разному для различных направлений и частей пространства R .

Предположим также, что при наличии определения понятия расстояния точек r (в пространстве R) в условиях конкретной решаемой задачи аппроксимации отсутствует определение понятий близости или расстояния между функциями f и φ^* (в пространстве F).

Для каждой из точек $r_i (i=1, 2, \dots, n)$ выберем ближайшую из расположенных на расстоянии $R \geq R_0$ от нее. Образованную таким образом пару точек обозначим (r_i, r_j) (одна точка при этом может входить в разные пары; пары же, отличающиеся только порядком точек, принимаются за одну). Общее число таких пар обозначим n_{pc} ($n_{pc} \leq n-1$, при увеличении R_0 число n_{pc} может уменьшаться).

Число n_{pc} разделим на две части, $n_c(\varphi^*)$ и $n_p(\varphi^*)$, зависящие от положения пар точек (r_i, f_i) и (r_j, f_j) относительно функции φ^* следующим образом.

В число $n_c(\varphi^*)$ включим: 1) случаи, когда точки (r_i, f_i) и (r_j, f_j) расположены по одну сторону от φ^* , т. е. $\text{sign}(f(r_i) - \varphi^*(r_i)) = \text{sign}(f(r_j) - \varphi^*(r_j)) \neq 0$; 2) половину априорного математического ожидания числа тех случаев, когда одна (и только одна) из точек рассмат-

* Обозначение (r_k, f_k) соответствует точке в пространстве $R \times \Phi$, являющемуся, согласно терминологии функционального анализа, произведением пространств R и Φ : r_k — координата (или совокупность координат) и одновременно точка в пространстве R ; f_k — координата (и точка) в пространстве Φ . В частности, r_k может быть точкой в трехмерном геологическом пространстве, f_k — концентрацией (точкой на оси концентраций); тогда (r_k, f_k) — точка в четырехмерном пространстве, первые три оси которого определяют пространство R , и одна, четвертая, — пространство Φ .

риваемой пары лежит на φ^* (при ограниченной точности измерений и округлении фиксируемых значений такое явление может наблюдаться для получаемых оценок равновероятно при действительном расположении таких точек по одну или разные стороны от φ^*); для определенности сюда включим ту часть этих точек, для которой $\text{sign}(f(r_i) - \varphi^*(r_i)) = 0$ при $\text{sign}(f(r_j) - \varphi^*(r_j)) \neq 0$ (в данном случае символ sign можно опустить; он оставлен для единообразия).

Остальные случаи относятся к числу $n_p(\varphi^*) = n_{pc} - n_c(\varphi^*)$, т. е. сюда войдут: 1) случаи, когда $\text{sign}(f(r_i) - \varphi^*(r_i)) \neq \text{sign}(f(r_j) - \varphi^*(r_j))$ при $\text{sign}(f(r_i) - \varphi^*(r_i)) \neq 0$; 2) случаи, когда $\text{sign}(f(r_j) - \varphi^*(r_j)) = 0$ при любом $\text{sign}(f(r_i) - \varphi^*(r_i))$. Сюда войдет вторая половина априорного математического ожидания числа случаев, когда одна (и только одна) точка рассматриваемой пары лежит на φ^* (для этой половины $\text{sign}(f(r_i) - \varphi^*(r_i)) \neq 0$ при $\text{sign}(f(r_j) - \varphi^*(r_j)) = 0$), а также все случаи, когда $f(r_i) - \varphi^*(r_i) = f(r_j) - \varphi^*(r_j) = 0$, т. е. φ^* проходит через обе точки рассматриваемой пары.

При изменении параметров в φ^* числа $n_c(\varphi^*)$ и $n_p(\varphi^*)$ меняются: при увеличении расстояния между φ^* и точками совокупности $\{(r_k, f(r_k))\}$, при любом возможном определении этого расстояния, увеличивается вероятность расположения обеих точек пары $((r_i, f_i), (r_j, f_j))$ по одну сторону от φ^* , т. е. увеличивается в среднем $n_c(\varphi^*)/n_{pc}$. Поэтому естественно использовать $n_c(\varphi^*)/n_{pc}$ в качестве своеобразной статистической характеристики расстояния между совокупностью точек $\{(r, f(r))\}$ и функцией $\varphi^*(r)$, или, что то же самое, отличия функций $f(r)$ и $\varphi^*(r)$. Заметим, что величина $n_c(\varphi^*)$ непосредственно для этой цели менее удобна, так как она пропорциональна при прочих равных условиях величине n_{pc} , а следовательно, и числу n . Поэтому для одинаковых по своему типу (природе), но отличающихся по числу n совокупностей точек $(r, f(r))$ расстояние между ними и φ^* , в случае принятия его равным $n_c(\varphi^*)$, зависело бы от n , что неудобно для целей интерпретации, изучающей природные закономерности, не зависящие от n . Заметим, что увеличение расстояния между точками, входящими в пары (r_i, r_j) , уменьшает зависимость величины $n_c(\varphi^*)$ от параметров функции φ^* , чем и вызвано включение в эти пары только ближайших из точек, разделенных расстояниями $R_i \geq R_0$.

Совокупность $\{f(r_k)\}$ можно рассматривать как характеристику функции f , меняющуюся с изменением f (не полностью тождественную ей в связи с ограниченностью n и зависимостью f также от других факторов). В качестве же характеристики q^* функции φ^* используем совокупность ее значений, вычисляемых в точках r_k при выбранных значениях ее параметров. Поэтому, пользуясь основным положением аппроксимации, на основе выражения (1) получаем: в качестве оптимальных значений параметров функции φ^* следует принять такие, при которых минимальна величина

$$L_F(f, \varphi^*) = \frac{n_c(\varphi^*)}{n_{pc}}. \quad (2)$$

Это выражение для L_F назовем критерием аппроксимации первого рода.

Теперь рассмотрим распространенный случай, когда расстояние $L_F(f, \varphi^*)$ определено условиями решаемой задачи в виде

$$L_F(f, \varphi^*) = D^* = D(f - \varphi^*), \quad (3)$$

где

$$D(f - \varphi^*) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (f_k(r_k) - \varphi^*(r_k))^2.$$

То есть здесь $L_F(f, \varphi^*)$ — дисперсия значений f_i относительно φ^* .

В случае неравноточных значений f будем полагать, что при вычислении D^* они сведены к равноточным введением соответствующих статистических весов. Как и ранее, в качестве характеристики q_Φ функции Φ выступает $\{f(r_k)\}$, а в качестве характеристики q^* функции Φ^* — совокупность значений этой функции в точках r_k . Подставляя в выражение (1) эти обозначения, получаем, на основании основного положения аппроксимации, формулировку принципа наименьших квадратов: в качестве оптимальных значений параметров функции Φ^* в данном случае нужно взять такие, при которых величина (3) минимальна. Таким образом, принцип наименьших квадратов можно рассматривать как частное выражение описанного положения аппроксимации.

Величину (3) будем называть критерием аппроксимации второго рода. Вместо $D^* = D(f - \Phi^*)$ сюда могут быть подставлены $\sigma^* = \sigma(f - \Phi^*)$ (среднее квадратическое отклонение значений $f(r_k)$ от $\Phi^*(r_k)$), $|\Delta|^* = |\Delta(f - \Phi^*)|$ (среднее абсолютное отклонение) и другие величины, принимающие свое минимальное значение одновременно с D^* .

Заметим, что критерий аппроксимации второго рода может быть применен как при конечной, так и при бесконечной совокупности значений f , в частности, когда $f(r)$ — некоторая непрерывная функция (тогда σ^* определяется соответствующим интегральным оператором). Критерий аппроксимации первого рода после небольших изменений также может быть применен в случаях бесконечного числа точек f , но сейчас мы не будем останавливаться на таком усложнении.

Можно показать, что соответственно количеству используемой исходной информации критерий аппроксимации, определяемый формулой (3), информативнее определяемого формулой (2). Вычисления при поиске оптимальных значений параметров с использованием критерия (3) в сочетании с известными приемами, разработанными для метода наименьших квадратов, часто более легки. Использование критерия (2) обычно требует трудоемкого варьирования параметров, применения методов скорейшего спуска и т. п. Зато критерий (2) применим в довольно часто встречающихся случаях, когда нет достаточной информации для применения критерия (3).

Аналогичным образом можно получить и другие критерии аппроксимации.

Алгоритм аппроксимации второго ранга

Так назовем алгоритм аппроксимации, когда требуется найти не только параметры аппроксимирующей функции $\Phi^*(x)$, но и ее формулу при задании лишь конечного или бесконечного класса $\{\Phi_i^*\}_{i=0}^L$, к которому принадлежит эта функция.

Согласно алгоритму аппроксимации первого ранга, в случае выбора любой из функций $\Phi_i^*(x)$ ее параметры должны быть подобраны так, чтобы соответствующее ей значение $L_F(f, \Phi_i^*)$ было минимальным из возможных. Обозначим это значение $L_m(f, \Phi_i^*)$ или, короче, L_{mi} . Тогда можно ограничиться выбором аппроксимирующей функции из класса $\{\Phi_i^*(x)\}$, где у каждой функции параметры подобраны так, что соответствующая ей величина $L_F(f, \Phi_i^*)$ равна своему минимальному значению L_{mi} . Рассмотрим случай, когда функции указанного класса подобраны так, что величина L_{mi} растет с увеличением i , причем $L_{m0} = 0$, т. е. функция Φ_0^* может проходить через все значения $f(r_k)$.

Пусть, например, функции Φ_i^* — параболы с одномерным аргументом $r = x$, имеющие вид $\Phi_i^* = \Phi_i^*(x) = \sum_{k=0}^{n-1} a_k x^k$ (здесь и далее в аналогич-

ных случаях принимается $x^0=1$ для всех x , в том числе для $x=0$). Тогда φ_0 — парабола с n коэффициентами, которые могут быть подобраны так, чтобы она принимала значения $\varphi_0(x_k) = f_k$ (функция же φ_n есть прямая: $\varphi_n = a_0$).

Если φ_l — функции, получаемые l -кратным усреднением значений f_k по скользящему окну, то φ_0 — результаты нулевого усреднения, т. е. эта функция выражается совокупностью исходных, неусредненных значений (φ_1 тогда — результаты первого усреднения, являющиеся исходными значениями для второго усреднения, и т. д.).

Заметим, что переходы от функции φ_l к функции φ_{l+1} ($l=0, 1, 2, \dots$) можно рассматривать как последовательные сглаживания. Это очевидно, когда значения φ_l — результаты l -кратного усреднения, и соответствует общепринятым определениям гладкости, когда φ_l — параметрическая функция типа параболы, все параметры которой свободны и могут подбираться по значениям $f(r_k)$. Поскольку аппроксимация функции $\varphi(r)$ функциями $\varphi_l(r)$ производится по значениям функции $f(r)$, то величины $L_m(f, \varphi_l)$ и $L_F(f, \varphi)$ являются признаками функций φ_l и φ , которые могут быть использованы в качестве q_l и q_l в выражении (1). Расстояние между одномерными величинами можно определить как абсолютную величину их разности. Тогда в данном случае, согласно основному положению аппроксимации, в качестве аппроксимирующей функции φ_l должна быть выбрана такая, для которой минимальна величина

$$M(L_Q(q_l^*, q_l)) = M(|L_m(f, \varphi_l^*) - L_F(f, \varphi)|) = \\ = |M(L_m(f, \varphi_l^*)) - M(L_F(f, \varphi))|, \quad (4)$$

или, что эквивалентно, для которой ближе к нулю величина

$$Z_{ml} = M(L_m(f, \varphi_l^*)) - M(L_F(f, \varphi)). \quad (5)$$

Как указывалось, если $l=0$, то $M(L_m(f, \varphi_l^*)) = 0$. Тогда $Z_{ml} = -M(L_F(f, \varphi))$, т. е. при $M(L_F(f, \varphi)) \neq 0$ величина Z_{ml} отрицательна. При увеличении же l , когда $L_m(f, \varphi_l^*)$ также увеличивается, величина Z_{ml} растет и может перейти через нуль. Далее мы будем рассматривать именно такие случаи. Переход величины Z_{ml} через нуль и смена знака бывают удобны для поиска минимума величины $M(L_Q(q_l^*, q_l))$. Поэтому Z_{ml} далее называется критерием аппроксимации.

Выведем формулы, удобные для вычисления этого критерия в нужных нам случаях.

Рассмотрим сначала случай, когда под функцией φ понимаются те изменения поля значений f , которые прослеживаются детерминистически определенно на расстояниях $R \geq R_0$ (причем, как было указано в алгоритме аппроксимации первого ранга, R_0 может определяться по-разному для разных направлений и частей пространства R). С такой задачей мы сталкиваемся, например, при выделении региональной составляющей геохимического поля, при необходимости выделения тех изменений поля, которые могут быть изображены на относительно мелкокомасштабных картах по результатам сравнительно крупномасштабного опробования*, и т. д.

При использовании алгоритма аппроксимации только первого ранга формула для используемой аппроксимирующей функции (с фиксиро-

* Иногда в таких случаях прибегают к апостериорному разрежению сети опробования, т. е. к изъятию части данных, что приводит к потере доли полезной информации; применение описываемых далее приемов позволяет уменьшить подобные потери.

ванным числом параметров) уже задана, т. е. возможности изображения изучаемого поля с определенной детальностью там уже predeterminedены, в связи с чем учета величины $R_0 \neq 0$ не требуется и при расчетах можно принимать всегда $R_0 = 0$, что выгодно для точности построения. В рассматриваемой же сейчас задаче величина R_0 является определяющей для выбора аппроксимирующей функции, обеспечивающей нужную детальность отображения изучаемого поля. Поэтому в случаях выполнения алгоритма аппроксимации первого ранга для последующего применения результатов в алгоритме аппроксимации второго ранга величина R_0 также фиксирована (в зависимости от нее меняются величины L_{mi} , по которым, как мы увидим далее, производится выбор Φ_i^*).

Предположим, что в условиях решаемой задачи отсутствует определение расстояния между функциями f и Φ . Тогда мы введем его по аналогии с формулой (2). Согласно определению, в таком случае

$$L_m(f, \Phi_i^*) = n_{cm}(\Phi_i^*)/n_{pc}, \quad (6)$$

где $n_{cm}(\Phi_i^*)$ — минимально возможное значение $n_c(\Phi_i^*)$ для Φ_i^* из получаемых при варьировании параметров. Если это значение фиксировано, то отсюда получаем первую из величин, входящих в выражение (5) для Z_{mi} :

$$M(L_m(f, \Phi_i^*)) = L_m(f, \Phi_i^*) = n_{cm}(\Phi_i^*)/n_{pc}. \quad (7)$$

Найдем теперь вторую из нужных величин.

Если функция Φ описывает все детерминистически определенные изменения поля значений $f(r)$, то остающиеся неописанными отклонения $f(r)$ от нее лишь случайны, взаимно независимы (некоррелированы). Но тогда при любом отклонении точки (r_i, f_i) от Φ точка (r_j, f_j) может находиться равновероятно как по ту, так и по другую сторону от Φ , т. е.

$$M(L_F(f, \Phi)) = M(n_c(\Phi)/n_{pc}) = M(n_p(\Phi)/n_{pc}) = 1/2.* \quad (8)$$

Подставляя (7) и (8) в (5), получаем:

$$Z_{mi} = \frac{n_{cm}(\Phi_i^*)}{n_{pc}} - \frac{1}{2}. \quad (9)$$

Выражение (9) можно привести к симметричному виду: поскольку $n_{pc} = n_c + n_p$, то, обозначая через $n_{ps}(\Phi_i^*)$ ту (максимальную) величину n_p , которая достигается при значении $n_{cm}(\Phi_i^*)$, получаем, приводя правую часть равенства (7) к общему знаменателю:

$$Z_{mi} = \frac{n_{cm}(\Phi_i^*) - n_{ps}(\Phi_i^*)}{2n_{pc}}.$$

Когда эта величина принимает свое ближайшее к нулю значение, то наиболее близкое к нулю из возможных своих значений принимает и величина

$$Z_{mi} = \frac{n_{cm}(\Phi_i^*) - n_{ps}(\Phi_i^*)}{n_{pc}} = \frac{n_{cm}(\Phi_i^*) - n_{ps}(\Phi_i^*)}{n_{cm}(\Phi_i^*) + n_{ps}(\Phi_i^*)}, \quad (10)$$

использовавшаяся нами в предшествующих работах (Дубов, 1969₂, и др.). Поэтому Z_{mi} также может использоваться в качестве критерия аппроксимации. Однако для вычислений обычно удобнее формула (9).

* Случай совпадения точек пары $((r_i, f_i), (r_j, f_j))$ с функцией Φ^* при точных построениях в непрерывных пространствах имеют нулевую вероятность и потому, получая это соотношение, мы в нужном нам приближении можем не говорить о них.

Теперь рассмотрим случай, когда условиями решаемой задачи определяется понятие расстояния (3) между функциями $f(r)$ и $\varphi^*(r)$. Предположим, что задана также величина $D(f-\varphi)$ — дисперсия значений $f(r)$ относительно $\varphi(r)$, хотя функция φ неизвестна. Такого рода задачи встречаются довольно часто: когда известны статистические характеристики совокупности F , искажающей изучаемое поле. В частности, $D_\varphi = D(f-\varphi)$ может быть квадратом среднеквадратической погрешности результатов наблюдений (или значений, полученных из них с помощью функций $u \in U_x$), когда требуется уменьшение влияния случайных ошибок измерений.

Пусть $Z_{ml}(f, \varphi_i^*) = D_{ml}^*$ — значение $D(f - \varphi_i^*)$, минимально возможное для φ_i^* , найденное по алгоритму аппроксимации первого ранга. Тогда, принимая это значение в качестве $q_i^* = q(\varphi_i^*)$ и D_φ в качестве $q_\varphi = q(\varphi)$, получаем аналогично предыдущему случаю, что в качестве оптимальной должна быть выбрана функция φ_i^* , для которой ближе к нулю величина

$$Z_{ml} = D_{ml}^* - D_\varphi. \quad (11)$$

Как и в случае алгоритма аппроксимации первого ранга, здесь вместо разности дисперсий может быть использована разность средних квадратических ($\sigma_{ml}^* - \sigma_\varphi$), средних абсолютных ($|\overline{\Delta}|_{ml}^* - |\overline{\Delta}|_\varphi$) или других отклонений, принимающая свое наиболее близкое к нулю значение одновременно с $D_{ml}^* - D_\varphi$.

Критерии (9) и (11), основанные на соответствующих критериях алгоритма аппроксимации первого ранга, будем называть аналогично критериями аппроксимации первого и второго рода. Указанные выше преимущества критерия аппроксимации второго рода здесь еще более важны в связи с увеличением вычислений из-за необходимости перебора функций φ_i . При затруднительности применения этого критерия из-за недостатка информации, в частности из-за неизвестности величины D_φ , на практике возможно упрощение, несколько нарушающее строгость выкладок (и поэтому увеличивающее математическое ожидание ошибки в L_F), но зато существенно облегчающее вычисления. Это упрощение заключается в применении метода наименьших квадратов для минимизации величины $L_F(f, \varphi_i^*)$, определяемой формулой (2), т. е. для выбора значений параметров каждой функции φ_i^* способом, предназначенным для критерия второго рода, когда подсчет величины Z_{ml} для каждой функции φ_i^* при этом проводится по формуле критерия первого рода.

Метод наименьших квадратов особенно привлекателен своей простотой, когда функции φ_i^* — параболы. Усреднение является частным случаем этого метода: оно дает результаты, удовлетворяющие принципу наименьших квадратов для оценки поля в центре скользящего окна при аппроксимации поля в пределах окна параболой нулевого или первого порядка (в таком случае для обеих этих парабол в центре окна получается практически одинаковое значение).

При использовании любого из критериев не обязательно проводить вычисления для всех функций φ_i^* в порядке увеличения l : при сглаживании изучаемого поля усреднением l увеличивается только до перехода Z_{ml} через нуль. При использовании φ_i^* из класса парабол часто целесообразно начинать с низких их порядков, т. е. с больших l , когда вычисления проще, и также только до перехода Z_{ml} через нуль. Можно начинать не с крайнего возможного значения l , использовать различные методы поиска.

Пример. В табл. 1 указаны координаты x_i точек отбора геохимических проб и концентраций C_i свинца в них. (По техническим причинам расстояния указаны в условных единицах (0,43 усл. ед. равно 10 м), а концентрации — в десятитысячных долях процента; далее указание единиц измерения для краткости опускается.)

Таблица 1

Выбор аппроксимирующей параболы
(вычисления на ЭВМ производили Л. С. Виль и Г. И. Федотова)

| x_i , усл. ед. | C_i , 10^{-4} , % | $\lg C_i$ | $y_1(x_i)$ | $y_2(x_i)$ | $y_3(x_i)$ | $y_4(x_i)$ |
|-------------------------------------------------------|-----------------------|-----------|------------|------------|------------|------------|
| 0,43 | 150 | 2,176 | 2,534 | 2,082 | 2,127 | 2,178 |
| 0,86 | 250 | 2,398 | 2,549 | 2,549 | 2,505 | 2,385 |
| 1,29 | 600 | 2,778 | 2,564 | 2,836 | 2,791 | 2,807 |
| 1,72 | 1200 | 3,079 | 2,579 | 2,942 | 2,941 | 3,043 |
| 2,15 | 800 | 2,903 | 2,594 | 2,867 | 2,911 | 2,931 |
| 2,58 | 350 | 2,544 | 2,608 | 2,609 | 2,654 | 2,535 |
| 3,01 | 150 | 2,176 | 2,623 | 2,172 | 2,126 | 2,177 |
| $ \overline{\Delta} _{\Phi}, \overline{\Delta} _i^*$ | | 0,0496 | 0,2918 | 0,0764 | 0,0678 | 0,0168 |

$$y_1(x) = 2,5195 + 0,0346 x;$$

$$y_2(x) = 1,4340 + 1,7177 x - 0,4892 x^2;$$

$$y_3(x) = 1,7049 + 0,9999 x - 0,000708 x^2 - 0,0947 x^3;$$

$$y_4(x) = 2,8265 - 3,1364 x + 4,6338 x^2 - 2,0895 x^3 + 0,2899 x^4.$$

Специальными исследованиями (см. гл. II) установлено, что ошибки измерения концентраций примененным методом спектрального анализа распределяются приблизительно логарифмически-нормально. Согласно результатам контрольного отбора проб, средняя абсолютная ошибка логарифмов концентраций $|\overline{\Delta}|_{\Phi}$ равна 0,0496. Требуется построение кривой C^* , отображающей природное распределение концентраций.

Поставленное требование означает необходимость аппроксимации пространственного распределения концентраций свинца с оптимизацией по подавлению ошибок измерений при заданной их характеристике $|\overline{\Delta}|_{\Phi}$. Следовательно, здесь аппроксимация должна проводиться по критерию второго рода с минимизацией величины $||\overline{\Delta}|_{mi}^* - |\overline{\Delta}|_{\Phi}|$. Логнормальность распределения подавляемых ошибок при использовании такого критерия означает необходимость применения алгоритмов аппроксимации не для значений C_i , а для $\lg C_i$ и в построении аппроксимирующей кривой вида $y = \lg C^*$, т. е. с применением нормализующей функции $u = \lg C \in u_z$.

По геоморфологическим условиям рассматриваемый ореол относится к типу, описанному в работе (Дубов, 1964₂). Решение прямой задачи показывает, что графики концентраций в ореолах этого типа удовлетворительно описываются логарифмическими параболой (кривые $\lg C^*$ имеют вид, близкий к параболе). Поэтому мы применяем здесь алгоритм аппроксимации второго ранга с выбором кривой $y = \lg C^*$ из класса парабол. Для нахождения параметров аппроксимирующих кривых применен метод наименьших квадратов. Под табл. 1 записаны найденные параболы от первого до четвертого порядка. В таблице приведены соответствующие этим параболой значения $y = \lg C^*$ в точках отбора проб, внизу указаны вычисленные по этим значениям величины $|\overline{\Delta}|_i^*$ (средние абсолютные отклонения значений $y = \lg C^*$ от соответствующих значений $\lg C$). Как видим, ближайшее к $|\overline{\Delta}|_{\Phi}$ значение $|\overline{\Delta}|_i^*$ (0,0678) найдено для параболы третьего порядка (y_3). Это означает, что она

имеет наименьшее значение $|Z_{mi}|$ и оптимальна для аппроксимации. Вычисления велись в порядке увеличения сложности, начиная с параболы первого порядка, и были прекращены после оценки $|\overline{\Delta}_i^*|$ для параболы четвертого порядка. Для парабол y_1, y_2, y_3 оказывается $|\overline{\Delta}_i^*| > |\overline{\Delta}_\Phi|$, для параболы же y_4 получаем $|\overline{\Delta}_i^*| < |\overline{\Delta}_\Phi|$, т. е. при переходе от y_3 к y_4 величина $Z_{mi} = D_i^* - D_\Phi$ меняет знак (в связи с соответствием D^* и $|\overline{\Delta}_i^*|, D_\Phi$ и $|\overline{\Delta}_\Phi|$), а $|Z_{mi}|$ переходит через минимум. По величинам y_3 находим концентрации: $C^*(x) = \text{ant}(y_3(x))$, где ant — символ десятичного антилогарифма. Полученные кривые показаны на рис. 4.

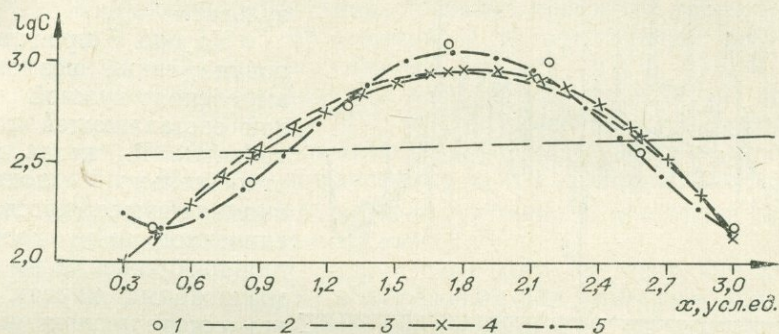


Рис. 4. Аппроксимация параболы распределения логарифмов концентраций свинца по профилю, пересекающему остаточный геохимический ореол (фактические данные Центральной геохимической экспедиции Казахского геофизического треста).

1 — точки, соответствующие наблюдаемым значениям; 2—5 — аппроксимирующие параболы первого — четвертого порядков соответственно.

Применение критерия аппроксимации первого рода здесь явно менее информативно, так как дает сравнительно большую неоднозначность решения. Действительно, кривая y_3 в четырех случаях проходит между соседними точками $(x_i, C(x_i))$, отображающими фактические данные; в двух случаях соседние точки $(x_i, C(x_i))$ находятся по одну сторону от нее, т. е. $n_p(y_3) = 4, n_c(y_3) = 2$. Формула (10) дает здесь $|Z_{mi}| = 1/3$. Но такое же значение $|Z_{mi}|$ имеют кривые y_1 ($n_p = 2, n_c = 4$) и y_2 ($n_p = 4, n_c = 2$). Только кривые y_0 и y_4 имеют существенно большую величину $|Z_{mi}|$: для них $n_p = 6, n_c = 0, |z_{mi}| = 1$. В таких случаях, при отсутствии дополнительных сведений, может быть выбрана любая из кривых, имеющих одинаковую величину $|Z_{mi}|$, в зависимости от целей исследований. Если исследователь желает получить результаты заведомо без чрезмерной потери информации при сглаживании и готов идти на риск принять излишнее количество шумовых сигналов за полезные, то из функций, имеющих одинаковую величину $|Z_{mi}|$, выбирается наименее сглаженная. В разобранный примере выбирается y_3 . Совпадение этого результата с тем, который был получен при использовании критерия аппроксимации второго рода, является, разумеется, в некоторой мере случайным.

Аппроксимирующая функция может принадлежать классу, отличающемуся от того, который содержит аппроксимируемую функцию. При этом следует ожидать ухудшения аппроксимации, но при некоторых условиях она оказывается все же удовлетворительной. Мы не будем анализировать эти условия и ограничимся модельным примером, когда «истинная» функция Φ известна, но не сообщается вычислителю. Такой пример показан на рис. 5.

В качестве «истинной» функции Φ здесь была использована парабола $C_\Phi(x) = 4,5 + 1,4944x^2 - 0,5372x^4 + 0,0403x^6$. На нее были наложены логнормально распределенные, взаимно не коррелированные шумы

при $|\Delta|_{\varphi} = |\overline{\Delta \lg C}| = 0,08$ ($\delta_{|\Delta|} = 1,2$). Полученные значения C вводились в машину. По значениям $\lg C$ методом наименьших квадратов вычислялись логарифмические параболы различных порядков. При $R_0=0$ по критерию аппроксимации первого рода была найдена аппроксимирующая функция $C_1^*(x) = \text{ant}(0,6624 + 0,0006x + 0,1706x^2 + 0,0005x^3 - 0,0618x^4 - 0,0001x^5 + 0,0046x^6)$. Нетрудно видеть, что использование любого другого критерия аппроксимации, дающего существенно иной порядок аппроксимирующей функции названного класса, дало бы здесь худший результат.

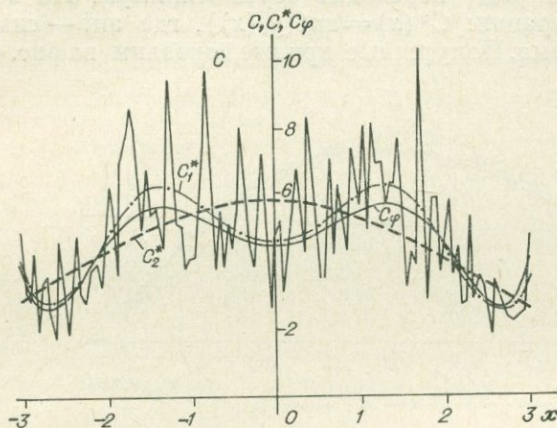


Рис. 5. Модельный пример аппроксимации по критерию первого рода (вычисления произведены П. И. Балком).

C_{φ} — «истинные» значения (параболическая функция); C — «наблюдаемые» значения (углы ломаной линии), по которым вычислялись аппроксимирующие функции; C_1^* — аппроксимирующая логарифмическая парабола, найденная при $R_0=0$; C_2^* — аппроксимирующая логарифмическая парабола, найденная при $R_0=0,5$.

На рис. 5 проиллюстрирована также возможность выделения нужной частотной составляющей поля по величине R_0 , когда группы относительно локальных аномалий выделяются в объединенном виде, доступном для изображения на мелко-масштабных картах. Здесь эта составляющая выражается кривой $C_2^*(x) = \text{ant}(0,767 - 0,006x - 0,036x^2)$, найденной машиной по критерию первого рода при $R_0=0,5$.

Преобразования критериев аппроксимации в зависимости от задач. Как уже говорилось выше, критерии аппроксимации могут иметь

различный вид в зависимости от условий решаемых задач.

В частности, бывает затруднительно вычисление Z_{mi} через дисперсию D_{mi}^* , или непосредственно отображающие ее величины σ_{mi}^* , $|\Delta|_{mi}^*$ и др.; при этом требуются хранение в памяти вычислительного устройства всех исходных данных и большое количество операций сопоставления вычисленных значений поля после каждого сглаживания.

При усреднении по скользящему окну обычно получают сглаженные значения поля в точках правильной (регулярной) сети. Они могут быть несопоставимы с исходными значениями поля, если те заданы в точках другой, в частности неравномерной (нерегулярной) сети, как это часто бывает при мелко-масштабных маршрутных съемках.

Оба указанных затруднения преодолеваются при использовании следующего положения.

Согласно сказанному в § 3, $D(u(\varphi)) = D(u(f)) - D(\Delta u)$. $D(\Delta u)$ есть величина D_{φ} , входящая в выражение (11), если $u(\varphi) = \varphi$; в противном случае величина $D(\Delta u)$ может быть вычислена на основании положений § 3. Величина $D(u(\varphi))$ вычисляется по исходным данным непосредственно. Следовательно, еще до проведения аппроксимации мы можем вычислить и хранить в памяти вычислительного устройства оценку величины $D(u(\varphi))$ — дисперсии значений функции $u(\varphi)$, которая при $D(\Delta u) > 0$ заведомо меньше дисперсии значений $u(f)$. После же l -го сглаживания можно непосредственно вычислить дисперсию $D(u(\varphi_i^*))$ полученных значений φ_i^* . Рассматривая $D(u(\varphi))$ и $D(u(\varphi_i^*))$ в качестве признаков q соответственно функций φ и φ^* , получаем, согласно

основному положению аппроксимации, новое выражение — разновидность критерия второго рода:

$$Z_{ml} = D(u(\varphi_l^*)) - D(u(\varphi)). \quad (12)$$

Использование этого критерия не отличается от использования выражения (11): сглаживание производится до перехода величины (12) через нуль, но вычисление этой величины уже не требует хранения исходных значений поля.

Приведенные выше выражения критериев были основаны только на средних расстояниях между точками совокупностей $\{(r, f)\}$ и $\{(r, \varphi^*)\}$. Наибольшая эффективность таких критериев достигается для случая, когда и под $L_F(\varphi^*, \varphi)$ понимается соответствующее среднее расстояние между точками совокупностей $\{(r, \varphi^*)\}$ и $\{(r, \varphi)\}$. В случаях других определений расстояния L_F , отличных по существу от определения расстояния L_Q , величина $M(L_F(\varphi^*, \varphi))$, согласно основному положению аппроксимации, также минимизируется в некоторой степени, но, соответственно различию определений L_Q и L_F , корреляционная связь ее с $M(L_Q(q_i^*, q_i))$ уменьшается и эффективность критериев аппроксимации в описанных вариантах снижается.

Однако если условия задачи дана хотя бы неполная формулировка величины $L_F(\varphi^*, \varphi)$, то в выражения для критериев аппроксимации могут быть внесены изменения, повышающие их эффективность. Рассмотрим один из таких случаев.

Предположим, что выбор функции φ_l^* нам нужен для решения обратной задачи. Тогда особенно важно выбрать функцию φ_l^* , близкую к φ по форме: градиентам, числу экстремумов и т. п., что зависит от числа параметров в φ_l^* . Остается, разумеется, желательной и минимизация расстояния между совокупностями точек $\{(r, \varphi_l^*)\}$ и $\{(r, \varphi)\}$, что требует минимизации величины $L_F(f, \varphi_l^*)$ при вычислении параметров, хотя поставленное условие и ограничивает теперь выбор в таком отношении, т. е. оптимизация по числу параметров может потребовать выбор функции, отличной от оптимальной в прежнем смысле.

Представим себе теперь, что функция $\varphi_{l_0}^*$ оптимальна в этом новом смысле, совпадая по формуле, общему числу параметров и значениям фиксированных (несвободных) параметров с функцией φ , при отличии лишь в том, что часть параметров в функции $\varphi_{l_0}^*$ является свободной. Тогда, подбирая значения этих свободных параметров с учетом значений $f(r_k)$, мы с отличной от нуля вероятностью можем уменьшить величину $L_F(f, \varphi_{l_0}^*)$ по сравнению с $L_F(f, \varphi)$, т. е. получить $L_m(f, \varphi_{l_0}^*) < L_F(f, \varphi)$, так как отклонения значений $f(r_k)$ от $\varphi(r_k)$ имеют случайную составляющую, а параметры функции φ фиксированы независимо от нее, без минимизации величины $L_F(f, \varphi)$.

Верхней гранью величины $L_m(f, \varphi_{l_0}^*)$ является значение $L_F(f, \varphi)$, которое она принимает при значениях параметров в функции $\varphi_{l_0}^*$, совпадающих со значениями параметров в функции φ (если варьирование параметров не уменьшает ее). Следовательно, вообще $L_m(f, \varphi_{l_0}^*) \leq L_F(f, \varphi)$, где знак неравенства имеет отличную от нуля вероятность. Это означает, что математическое ожидание величины $L_m(f, \varphi_{l_0}^*)$ меньше математического ожидания величины $L_F(f, \varphi)$, т. е. $M(L_m(f, \varphi_{l_0}^*)) < M(L_F(f, \varphi))$.

Но величина $L_m(f, \varphi_{l_0}^*)$ и ее математическое ожидание растут с уменьшением числа свободных параметров, т. е. с увеличением l . Поэтому при некотором $l > l_0$ мы с отличной от нуля вероятностью получим величину $M(L_m(f, \varphi_l^*))$, более близкую к $M(L_F(f, \varphi))$, чем вели-

чина $M(L_m(f, \varphi_{l_0}^*))$. Следовательно, отдавая предпочтение функции с минимальным отклонением значения $M(L_m(f, \varphi_l^*))$ от $M(L_F(f, \varphi))$, мы с отличной от нуля вероятностью выберем в качестве аппроксимирующей функцию с $l > l_0$. Выбор же функции с $l < l_0$ при оговоренных условиях имеет нулевую вероятность, поскольку у такой функции величина $L_m(f, \varphi_l^*)$ еще меньше, чем у функции с $l = l_0$. Следовательно, математическое ожидание величины l функции, выбираемой по описанным выше правилам, оказывается больше значения l_0 , оптимального в новом смысле.

Пусть $N_l = N(\varphi_l^*)$ — число свободных параметров в функции φ_l^* . Тогда, соответственно связи между этим числом и l , получаем вывод: при использовании описанного выше критерия Z_{ml} величина $M(N_l)$ выбираемой оптимальной аппроксимирующей функции оказывается смещенной в сторону занижения из-за смещения величины $L_F(f, \varphi_l^*)$, вызванного подбором N_l свободных параметров по значениям f_k , или, по принятой терминологии, наложением N_l связей на параметры функции φ_l^* . Найдя выражение для несмещенной величины $L_F(f, \varphi_l^*)$ и подставив ее в выражение Z_{ml} , мы тем самым получим критерий аппроксимации, позволяющий выбирать оптимальную аппроксимирующую функцию при указанном выше дополнительном условии.

Пусть, например, φ_l^* — функция, которая, имея N_l свободных параметров, может быть проведена через любые N_l точек пространства $R \times \Phi$, причем ни один из этих параметров не имеет известных априори преимуществ перед другими в обеспечении такой возможности (подобными функциями являются параболы и ряд других).

Тогда, согласно известному положению о несмещенной оценке дисперсии при наложении N связей, получаем:

$$D_l^* = \frac{1}{N - N_l} \sum_{k=1}^n (f(r_k) - \varphi_l^*(r_k))^2. \quad (13)$$

Для каждой из функций $\varphi_l^*(r_k)$ находится минимальное значение D_{ml}^* этой величины точно так же, как оно ранее находилось для прежней оценки дисперсии (с помощью метода наименьших квадратов); обе эти оценки для одной функции φ_l^* принимают свои минимальные значения одновременно, так как отличаются только множителем перед знаком суммы, неизменным для рассматриваемой функции φ_l^* . Подставляя найденное по формуле (13) значение D_{ml}^* в выражение (11), получаем критерий аппроксимации второго рода в форме, нужной для новой поставленной задачи.

Аналогично вместо величины $L_F(f, \varphi_l^*) = \frac{n_c(\varphi_l^*)}{n_{pc}}$, использовавшейся для вывода критерия первого рода и вычисляемой по положению пар $((r_i, f_i), (r_j, f_j))$, теперь следует принять

$$L_F(f, \varphi_l^*) = \frac{n_c(\varphi_l^*)}{n_{pc} - N_l}. \quad (14)$$

Тогда критерий аппроксимации первого рода принимает вид:

$$Z_{ml} = \frac{n_{cm}(\varphi_l^*)}{n_{pc} - N_l} - \frac{1}{2}. \quad (15)$$

При $N_l \geq n$ и $N_l \geq n_{pc}$ формулы (13) и соответственно (15) теряют смысл: значения такого числа свободных параметров оговоренного выше типа при любом возможном виде функций φ_l^* могут быть подобра-

ны таким образом, чтобы было $L_F(f, \varphi_i^*) = 0$ (например, парабола с $N_i \geq n$ свободными параметрами может быть проведена точно через все n точек (r_k, f_k)), т. е. различные функции φ_i^* по отношению к совокупности значений f_k тогда исчезают, и ни одной из функций не может быть отдано предпочтение для аппроксимации при имеющейся информации.

Далее мы будем полагать, что для всех рассматриваемых случаев

$$n_{pc} > N_i, \quad n > N_i. \quad (16)$$

Если $N_i \gg n_{pc}$ или $N_i \gg n$, то критерии соответственно первого и второго рода не меняют существенно своих значений при пренебрежении величиной N_i (при принятии полученных выше более простых вариантов), что используется далее и нами.

Алгоритм аппроксимации третьего ранга

Так назовем алгоритм аппроксимации, когда необходимо найти не только аппроксимирующую функцию из некоторого класса, но требуется выбрать и сам класс из некоторой совокупности

$$(\Phi_1 = \{\varphi_{1i}^*\}, \Phi_2 = \{\varphi_{2i}^*\}, \Phi_3 = \{\varphi_{3i}^*\}, \dots).$$

Мы будем обсуждать случаи, когда каждый класс $\Phi_i = \{\varphi_{ii}^*\}$ в этой совокупности удовлетворяет условиям, оговоренным в алгоритме аппроксимации второго ранга, с переходом через нуль соответствующих этому классу значений критерия (5). Все функции, входящие в рассматриваемую совокупность классов, являются параметрическими и обладают следующим свойством: если функция φ_{ii}^* имеет N_{ii} свободных параметров, то существуют такие значения этих параметров, при которых она пройдет через любые наперед заданные N_{ii} точек пространства $R \times \Phi$. Объединение функций φ_{ii}^* в один класс предполагается произведенным по некоторому признаку класса, существенному для решаемой задачи и оцениваемому для функции φ . Таким характеристикам для классов Φ_i дадим обозначение q_i , а для функции φ — обозначение q_φ .

Так, например, один из классов может содержать простые параболы (порядок которых убывает с увеличением l); другой класс — состоять из логарифмических парабол; третий — представлять собой решение второго уравнения Фика для распределения концентраций при начальном их распределении в виде параболы (порядок которой определяет величину l), и т. д. Согласно алгоритму аппроксимации первого ранга, свободным параметрам любой из функций φ_{ii}^* целесообразно придать значения, минимизирующие величину $L_F(f, \varphi_{ii}^*)$. Мы будем полагать, что это выполнено, т. е.

$$L_F(f, \varphi_{ii}^*) = L_m(f, \varphi_{ii}^*). \quad (17)$$

Будем также предполагать, что априори все функции φ_{ii}^* одинаковы по отношению к особенностям функции $f(r)$, связанным со статистическим распределением шумов.

Пусть Φ_{i_1} — класс, функции которого имеют характеристику q_{i_1} , более близкую к q_φ , чем характеристика q_{i_2} другого класса Φ_{i_2} . Предположим, что в классах Φ_{i_1} и Φ_{i_2} есть функции соответственно $\varphi_{i_1 l_1}$ и $\varphi_{i_2 l_2}$, содержащие одинаковое число N свободных параметров. Для них, как и для других функций классов Φ_{i_1} и Φ_{i_2} , по условию выбора этих классов,

$$L_Q(q_{i_1}, q_\varphi) < L_Q(q_{i_2}, q_\varphi). \quad (18)$$

Поскольку прочие известные априори характеристики этих функций равны (в том числе N_i), то, согласно основному положению аппроксимации, из (18) следует:

$$M(L_F(\Phi_{i_1 l_1}^*, \varphi)) < M(L_F(\Phi_{i_2 l_2}^*, \varphi)). \quad (19)$$

Раньше мы считали совокупность значений функции $f(r)$ характеристикой функции $\varphi(r)$. Точно так же совокупность значений $\varphi(r)$ можно считать характеристикой функции $f(r)$, представив значения $\varphi(r)$ известными, а $f(r)$ — неизвестными. Тогда в связи с равенством прочих известных условий (в том числе равенством чисел параметров в функциях $\Phi_{i_1 l_1}^*$ и $\Phi_{i_2 l_2}^*$ и априорных сведений об их отношении к особенностям функции $f(r)$, связанным с шумами), согласно основному положению аппроксимации, неравенство (19) означает:

$$M(L_F(\Phi_{i_1 l_1}^*, f)) < M(L_F(\Phi_{i_2 l_2}^*, f)).$$

Поскольку здесь $L_F(\Phi_{i_1 l_1}^*, f) = L_F(f, \Phi_{i_1 l_1}^*) = L_m(f, \Phi_{i_1 l_1}^*)$ и $L_F(\Phi_{i_2 l_2}^*, f) = L_F(f, \Phi_{i_2 l_2}^*) = L_m(f, \Phi_{i_2 l_2}^*)$, то последнее неравенство означает:

$$M(L_m(f, \Phi_{i_1 l_1}^*)) < M(L_m(f, \Phi_{i_2 l_2}^*)), \quad (20)$$

где в определении $L_m(f, \Phi_{i_1 l_1}^*)$ и $L_m(f, \Phi_{i_2 l_2}^*)$ признак не входит.

Но с увеличением числа параметров в функциях любого из рассматриваемых классов (при фиксированном i) расстояние между ними и $f(r)$ уменьшается, а тогда уменьшается и математическое ожидание расстояния $L_m(f, \Phi_{i_2 l_2}^*)$ с уменьшением l_2 . Поскольку справедливо и обратное высказывание, то это означает, что при условии

$$N(\Phi_{i_2 l_2}^*) > N(\Phi_{i_1 l_1}^*) \quad (21)$$

может быть встречена функция $\Phi_{i_2 l_2}^*$, для которой вместо (20) справедливо равенство

$$M(L_m(f, \Phi_{i_1 l_1}^*)) = M(L_m(f, \Phi_{i_2 l_2}^*)), \quad (22)$$

или, что то же самое,

$$M(L_m(f, \Phi_{i_1 l_1}^*)) - M(L_m(f, \Phi_{i_2 l_2}^*)) = 0. \quad (23)$$

Следовательно, если при условии (23) соблюдается выражение (21), то относительно классов Φ_{i_1} и Φ_{i_2} справедливо неравенство (18), т. е. класс Φ_{i_1} предпочтительнее для выбора аппроксимирующей функции. Математические ожидания в выражении (23) подразумеваются определенными для возможных совокупностей $\{(r, f)\}$ при фиксированных функциях $\varphi, \Phi_{i_1 l_1}^*$ и $\Phi_{i_2 l_2}^*$.

В связи с дискретностью значений l функций $\Phi_{i_1 l_1}^*$ и $\Phi_{i_2 l_2}^*$, удовлетворяющих равенству (23) при (21), может и не быть.

Предположим теперь, что мы имеем множество различных пар функций $\Phi_{i_1 l_1}^*, \Phi_{i_2 l_2}^*$, удовлетворяющих выражению (21), для каждой из которых в отдельности равенство (23) может не соблюдаться, но математическое ожидание его левой части, вычисленное для этого множества в целом, оказывается равным нулю. Используя для оператора такого математического ожидания символ M^* и применяя его к выводу, высказанному относительно выражений (18), (21), (23), получаем: если при условии

$$M^*(M(L_m(f, \Phi_{i_1 l_1}^*))) - M^*(M(L_m(f, \Phi_{i_2 l_2}^*))) = 0 \quad (24)$$

соблюдается выражение

$$N(\Phi_{i_2 l_2}^*) > N(\Phi_{i_1 l_1}^*), \quad (25)$$

то

$$M^*(L_Q(q_{i_1}, q_\varphi)) < M^*(L_Q(q_{i_2}, q_\varphi)). \quad (26)$$

Здесь (24) — аналог выражения (23), а (26) — аналог выражения (18). Неравенство (25) повторяет без изменений неравенство (21), поскольку последнее принято справедливым для каждой из названных пар функций.

Выбирая оптимальную аппроксимирующую функцию из совокупности классов $\{\Phi_i\}$, мы можем ограничиться рассмотрением только совокупностей функций-представительниц (по одной) от каждого класса, выбранных по алгоритму аппроксимации второго ранга. Для каждой из этих функций приближенно равна нулю величина $Z_{ml} = M(L_m(f, \Phi_{i,l}^*)) - M(L_F(f, \varphi))$. Она может отличаться от нуля из-за дискретности изменения числа параметров в функциях рассматриваемого класса, в связи с чем переход критерия аппроксимации через нуль может происходить между двумя смежными по l значениями $N(\Phi_{il}^*)$. Но при этом для различных выбираемых функций Φ_{il}^* величина $M(L_m(f, \Phi_{i,l}^*)) - M(L_F(f, \Phi_{i_2 l_2}^*))$ может быть завышенной или заниженной с одинаковой вероятностью, распределяясь статистически симметрично около нулевого значения. Поскольку это явление априори не зависит от i , то математическое ожидание разности $M(L_m(f, \Phi_{i,l}^*)) - M(L_m(f, \Phi_{i_2 l_2}^*))$ для произвольных функций-представительниц $\Phi_{i,l}^*$ и $\Phi_{i_2 l_2}^*$ априори равно нулю. Тогда

$$M^*M(L_m(f, \Phi_{i,l}^*)) - M^*M(L_m(f, \Phi_{i_2 l_2}^*)) = 0. \quad (27)$$

Это равенство совпадает с равенством (24), т. е. любые функции-представительницы $\Phi_{i,l}^*$ и $\Phi_{i_2 l_2}^*$ подчиняются условию (24). Поэтому, согласно сказанному относительно выражений (24) — (26), получаем вывод:

Если для любых функций $\Phi_{i,l}^*$, $\Phi_{i_2 l_2}^*$, являющихся представительницами классов Φ_1 и Φ_2 , выбранными по алгоритму аппроксимации второго ранга, оказывается $N(\Phi_{i_2 l_2}^*) > N(\Phi_{i,l}^*)$, то математическое ожидание отличия по признаку q от функции φ у функций класса Φ_1 меньше, чем у функций класса Φ_2 . Оптимальной для аппроксимации тогда является функция $\Phi_{i,l}^*$, принадлежащая классу Φ_1 и имеющая предпочтение перед другими функциями этого класса на основании алгоритма аппроксимации второго ранга.

Таким образом могут быть сопоставлены возможные пары классов Φ_i , в результате чего выбирается оптимальная аппроксимирующая функция. Нетрудно видеть, что сказанное можно выразить в виде следующего правила: *в качестве оптимальной аппроксимирующей функции из совокупности классов следует выбирать функцию-представительницу, имеющую наименьшее число свободных параметров по сравнению с другими функциями-представительницами, найденными для каждого класса по алгоритму аппроксимации второго ранга.*

Это правило и есть алгоритм аппроксимации третьего ранга.

Наглядно смысл алгоритма аппроксимации третьего ранга можно представить следующим образом. Предположим, мы хотим аппроксимировать по алгоритму второго ранга функцию φ , имеющую вид экспоненты, функцией φ^* в виде ломаной линии, состоящей из отрезков прямой. Чем выше точность аппроксимации (меньше отличие значений $f(r_k)$ от $\varphi(r_k)$ и больше n), тем короче должны быть такие отрезки

и тем большим должно быть их число. Поскольку каждый отрезок задается своими параметрами, находимыми по $\{f(r_k)\}$, то такое явление означает рост числа свободных параметров в используемой аппроксимирующей функции φ^* . При $n \rightarrow \infty$ и $f(r_k) \rightarrow \varphi(r_k)$ (для всех k) число необходимых свободных параметров в функции φ^* стремится к бесконечности, так как только тогда может быть достигнуто совпадение логарифма с экспонентой. Если же мы используем для аппроксимации функцию φ^* , состоящую из отрезков экспонент, то при $n \rightarrow \infty$ (для фиксированной области определения) и $f(r_k) \rightarrow \varphi(r_k)$ (для всех k) аппроксимирующая функция сходится к φ , причем это означает сходимость и по значениям, и по числу свободных параметров, так как в пределе экспонента φ^* совпадает с экспонентой φ . Следовательно, тогда φ^* содержит всего два свободных параметра, определяющих экспоненту φ . Таким образом, во втором случае, где φ^* принадлежит к тому же классу, что и φ , при определенных условиях число свободных параметров в φ^* заведомо ниже. Это и используется алгоритмом аппроксимации третьего ранга.

Заметим, что, согласно алгоритму аппроксимации третьего ранга, упорядочение функций-представительниц по возрастанию числа свободных параметров является в то же время упорядочением по математическому ожиданию отличия этих функций от аппроксимируемой функции в том смысле, который обычно вкладывают в интуитивное понятие отличия по физической сущности. Согласно основному положению аппроксимации, это отличие выражается также в увеличении математического ожидания расстояния между функциями φ и φ^* во всей области определения, включая область экстраполяции, если понимать это расстояние в смысле, обычном для функционального анализа.

Глава II

ОШИБКИ ИЗМЕРЕНИЙ

Наиболее распространенным методом вещественного анализа геохимических проб является спектральный. Это обусловило подбор основных иллюстративных примеров. Однако сделанные выводы нетрудно применить и для других методов.

§ 1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Здесь, как и раньше, под ξ понимается истинное значение измеряемой величины, x — результат ее измерения, F — совокупность случайных факторов, действующих в процессе измерений и обуславливающих появление ошибки $\Delta x = x - \xi$. Под погрешностями с определенными наименованиями (средней абсолютной, средней квадратической и т. д.) мы будем понимать соответствующие статистические характеристики ошибок, а под точностью — величину, обратную какой-либо случайной погрешности.

В значительной части литературы имеются утверждения о том, что ошибки измерений почти всегда подчиняются так называемому постулату Гаусса. Согласно этому постулату, математическое ожидание случайной ошибки равно нулю, и при отсутствии систематической ошибки наилучшей оценкой истинного значения измеряемой величины ξ является среднее арифметическое из значений x , наблюдаемых при многократ-

ном ее измерения (\bar{x} сходится по вероятности к ξ) (Большаков, 1965; Гутер, Овчинский 1962; и др.). Систематическая ошибка, если она имеется, при этом предполагается приближенно равной смещению \bar{x} относительно ξ , т. е. она оценивается по равенству

$$\Delta_c(x) = \bar{x} - \xi. \quad (1)$$

Встречаются также утверждения о подчинении ошибок измерений нормальному закону без оговорок о других возможностях (Смирнов, Дунин-Барковский, 1965; Щиголов, 1962). «При достаточно большом числе измерений распределение ошибок подчиняется нормальному закону распределения (закон Гаусса)» (Прокофьев, 1951, с. 208).

Сам Гаусс не постулировал свойство ошибок, указываемое в названной выше литературе. Он лишь высказался о том, что представляется целесообразным рассмотреть случай, когда ошибки имеют такие свойства (Гаусс, 1957).

В последние годы надежно установлено неподчинение ошибок спектрального анализа нормальному закону Гаусса и большее соответствие их закону логарифмически-нормального распределения (Ahrens, 1955; Урусов, 1961; Дубов, 1963; Мищенко, 1965; Лончих, Мешалкин, 1964; и др.)*. Сейчас вполне очевидно, что это явление объясняется не ограниченностью числа измерений, а типом действующих случайных факторов.

Действительно, как хорошо известно, при достаточном превышении порога чувствительности и не слишком высоких концентрациях (ниже тех значений, при которых проявляется насыщение спектральных линий, их самообращение и т. д.), т. е. в основном диапазоне измерений, надежность различения концентраций определяется не абсолютной их разностью, а отношением. В частности, 0,001% олова так же надежно отличается от 0,003, как 0,01 от 0,03%. Поэтому наборы эталонов создаются с определенной кратностью концентраций, например тройной: 0,001 и 0,003%, 0,01 и 0,03% и т. д. Линейная же шкала эталонов была бы явно нерациональной. Так, 0,001% олова легко отличается по спектрограмме от 0,003% при рядовой методике. Отличить же 0,101% от 0,103% гораздо труднее, хотя абсолютное различие здесь такое же, равное 0,002%.

Таким образом, здесь средняя абсолютная ошибка растет с увеличением ξ , т. е. $K(|\Delta x|, \xi) > 0$. Поскольку наличие многофакторной случайной составляющей в ошибках измерений не подлежит сомнению, то здесь применим п. 5а (§ 3, гл. I), согласно которому данное неравенство означает, что в рассматриваемом случае распределение ошибок Δx не может быть симметричным (а следовательно, и нормальным), существенно отличаясь от него для диапазона измерений.

В то же время одинаковая (точнее, примерно одинаковая) для всего диапазона измерений возможность различия по спектрам концентраций, отличающихся в одинаковое число раз, означает приближенное постоянство в этом диапазоне ошибки нахождения логарифмов концентраций, т. е. $K(|\Delta \lg x|, \xi) \approx 0$. Соответственно свойствам логарифмической функции это означает (приближенно) отсутствие зависимости между $\Delta \lg x$ и ξ . Согласно общепринятым представлениям, на результаты измерений действует большое число случайных факторов, влияние каждого из которых в отдельности относительно невелико. Отсюда и из сказанного относительно независимости $\Delta \lg x$ и ξ , согласно п. 5 (§ 3, гл. I), следует, что величины $\Delta \lg x$ распределяются по приближенно симметричному закону.

* Некоторые предположения о свойствах, близких к свойствам логнормально распределенных ошибок, делались в различных областях и ранее (Квятковский, 1951, и др.), хотя причины этого не вскрывались.

Этому факту можно дать и физическое толкование. Интенсивность I спектральной линии может быть выражена (Прокофьев, 1951) с достаточной для многих целей точностью формулой

$$I = a \cdot \xi^b, \quad (2)$$

где ξ — концентрация μ в анализируемой пробе, a — параметр, характеризующий поступление материала пробы в пламя дуги; b — параметр, характеризующий излучение и поглощение квантов в дуге.

Величина a является заведомо случайной: она может колебаться в широких пределах в зависимости от колебаний силы тока, неравномерности испарения материала пробы и т. д. Как и эффективная сила тока, величина a не может быть отрицательной; ее изменения в отдельные промежутки времени являются лишь относительными*, т. е. выражаются в умножении предшествующих значений на некоторые случайные величины δ_i (при хорошей стабилизации дуги величины δ_i близки к 1). В силу таких неизбежных явлений, как флуктуации потока электронов в электрическом токе, можно считать, что число независимых случайных изменений заведомо велико. Стабилизация же горения дуги означает малость действия каждого из этих изменений. Но тогда можно считать, что для a приближенно соблюдаются условия второй статистической модели, т. е. значения a распределяются приближенно логнормально, а $\lg a$ — нормально. Согласно выражению (2),

$$\lg I = \lg a + b \lg \xi, \quad (3)$$

т. е. при фиксированных ξ и b величина $\lg I$ есть линейная функция от $\lg a$. Следовательно, распределение $\lg a$ по приближенно нормальному закону означает распределение по такому же закону и $\lg I$.

Оценки концентраций при спектральном анализе вычисляются, исходя из формулы (3), подстановкой в нее x вместо ξ и $\overline{\lg a}$ вместо $\lg a$ ($\overline{\lg a}$ — среднее значение $\lg a$, получаемое после многократных измерений эталонных концентраций):

$$\lg x = \frac{1}{b} (\lg I - \overline{\lg a}).$$

Таким образом, $\lg x$ — линейная функция от приближенно нормально распределенной величины $\lg I$. Следовательно, величина $\lg x$ также распределена приближенно нормально, а величина x имеет приближенно логнормальное распределение.

Аппроксимация распределения ошибок спектрального анализа логнормальным законом — это заведомо лишь первое приближение к действительности: строго говоря, в области относительно низких (близких к порогу чувствительности) и высоких (близких к максимальным) концентраций невозможно среднее завышение и занижение их в такое же число раз, как в области концентраций из средней части диапазона измерений. Соответственно вытекающей отсюда форме операторов F_i это означает невозможность строгого соблюдения логнормального закона распределения ошибок. Мы будем им пользоваться лишь потому, что такое приближение пока еще соответствует потребностям.

При несимметричных законах распределения ошибок постулат Гаусса неприменим: как было показано в § 3 гл. I, в этих случаях из-за несовпадения $x_{\text{ме}}$ и $M(x)$ величина \bar{x} является смещенной относительно ξ даже при отсутствии систематической составляющей в тех факторах, которые вызывают ошибки, т. е. при $M(\Delta u(x)) = 0$. В частности, при логнормальном распределении ошибок и отсутствии систематических

* По этой причине на стабилизаторах силы тока указывается обычно не средняя абсолютная допустимая величина колебаний, а процент от регулируемой величины.

искажений смещение \bar{x} относительно $\bar{x}_{\text{ме}} = \tilde{x}$ равно

$$\Delta_{\text{см}} = M(x) - x_{\text{ме}} = \xi (\text{ant}(D(\Delta \lg x) / (2 \lg e)) - 1) \quad (4)$$

(это выражение получено из формулы (18, § 2, гл. I) подстановкой в нее $x_{\text{ме}} = \xi$ вместо \tilde{x} и $D(\Delta \lg x)$ вместо $D(\lg x)$. Отсюда следует, что при отсутствии каких-либо систематических искажающих факторов средние значения результатов многократных измерений (\bar{x}) должны быть завышенными. При этом завышение тем больше, чем больше измеряемая величина ξ и случайные ошибки измерений, отражаемые величиной $D(\Delta \lg x)$. Соответственно этому и оценки систематической ошибки по формуле (1) или систематического расхождения результатов двух серий измерений как разности между средними значениями дают неверное представление. Численное исключение таких ошибок и расхождений, определенных при одних значениях измеряемых величин, неизбежно приводит к ухудшению результатов для других значений. Этим можно объяснить и наблюдавшиеся на практике случаи, когда не удавалось устранить систематические расхождения между различными методами при принятой системе их вычислений без учета действительного закона распределения ошибок. В частности, наблюдалось завышение в среднем результатов экспрессного спектрального анализа по сравнению с вещественным анализом более высокой точности, несмотря на все усилия по исключению физических причин систематических погрешностей. Теперь такое явление можно объяснить большей дисперсией логнормально распределенных случайных ошибок экспрессного спектрального анализа. Поясним это на упрощенном примере.

Если при спектральном анализе четырех проб в одной спектральной лаборатории получены концентрации 1; 12; 2; 15 усл. ед., а в другой — соответственно 4; 3; 6; 5 усл. ед., то, как нетрудно подсчитать, при оценке расхождений по средним арифметическим результаты первой лаборатории оказываются в среднем выше на 3 усл. ед. Однако фактически между лабораториями нет систематического расхождения: во втором и четвертом случаях первая лаборатория дала результаты выше второй соответственно в 4 и 3 раза, а в первом и третьем случаях — ниже во столько же раз. Заключение о наличии систематического расхождения по средним значениям и введение вычисленной, исходя из этого, поправки привело бы к искажениям: при другом наборе измеряемых величин ξ , но тех же условиях измерений, согласно формуле (4), должны быть и другие средние абсолютные расхождения.

Теперь совершенно очевидно, что систематические ошибки и расхождения при несимметричных законах распределения Δx при многократных измерениях одной величины ξ должны устанавливаться по медианным значениям x . Поэтому весьма привлекательно для теории ошибок использовать симметрирующие функции, для которых совпадают медианные и легко вычисляемые средние значения.

Кроме деления ошибок на случайные и систематические, при вещественном анализе проб принято деление ошибок на связанные с особенностями проб и с условиями измерений. К особенностям проб относятся прежде всего их состав. В условия измерений включаются методика, квалификация исполнителей, исправность аппаратуры, чистота реактивов, температура в лаборатории и т. д.

Условия измерений могут изменяться с различной скоростью. Поэтому соответствующие ошибки имеют различные по частоте составляющие: от практически неизменных для всей совокупности проб (нулевая частота случайных колебаний) до не коррелируемых даже для двух проб, подвергнутых вещественному анализу одна вслед за другой (высокочастотные случайные колебания). К практически неизменным, например, может относиться ошибка, связанная с субъективной особенностью одного исполнителя. Ошибки же, связанные с колебаниями си,

лы тока при спектральном анализе, имеют более высокую частоту. К промежуточным в этом смысле относятся ошибки, связанные с изменением дневной или сезонной температуры, с усталостью исполнителя и т. д. Таким образом, при обычном следовании проб во времени нет резкого деления ошибок на систематические и случайные.

Однако имеется возможность свести все частоты фиксируемых погрешностей к двум крайним из названных — путем рандомизации (постановки в случайном порядке) проб анализируемой совокупности в каждой серии измерений. Такая операция может вызвать резкие возмущения, так как противоречит официальным требованиям и инструктивным положениям, а также вызывает некоторые трудности, повышая требования к аккуратности работ (для предотвращения так называемого заражения проб). Однако напомним, что рандомизация представлялась ранее немыслимой во многих случаях, где теперь ее целесообразность очевидна, в том числе при отборе проб из объектов, где возможно искажающее влияние некоторых периодических факторов (Налимов, 1960). Разумеется, в случаях, когда рандомизация не оправдывается экономически, можно ее не производить, мирясь с соответствующими ошибками.

Приведем наглядную иллюстрацию влияния рандомизации. Пусть пробы отобраны вдоль некоторой линии и подвергаются вещественному анализу в порядке отбора. Тогда в связи с некоторой медленно меняющейся ошибкой («квазисистематической») зафиксированные значения концентраций (x) могут повышаться («систематически») от одного конца линии к другому, если даже значения ξ вдоль линии неизменны. Если же перед вещественным анализом пробы рандомизированы, то завышения, монотонно меняющиеся во времени, оказываются распределенными случайно-равномерным образом в пространстве по отношению к точкам отбора проб. Ложного «систематического» изменения x при этом не будет.

При рандомизации в качестве систематической ошибки проявляется только составляющая, входящая во все результаты.

Таким образом, при оговоренных условиях мы вновь можем ограничиться лишь двумя видами ошибок — случайными (взаимно не коррелированными) и систематическими, хотя в будущем, вероятно, должен развиваться и частотный анализ ошибок.

С уменьшением числа проб в серии (или общей продолжительности измерений) определенная таким образом систематическая погрешность в среднем растет за счет включений в нее все более высокочастотной составляющей ошибок, общей для проб серии. Случайные же погрешности в среднем уменьшаются за счет выхода из них относительно низкочастотной составляющей.

Как следует из § 3 предыдущей главы, для правильной оценки закона распределения ошибок необходимо проводить его изучение при различных ξ . Обычно же в литературе освещается изучение формы распределения ошибок только при отдельных значениях ξ без сравнения $\sigma(\Delta x)$ с изменением ξ . Может быть, поэтому многими авторами не замечалось отклонение $p(\Delta x)$ от нормального закона и принималась соответствующая этому закону статистическая модель ошибок. В частности, согласно п. 2 (§ 2, гл. I), при таком способе исследований и малом отношении $\sigma(\Delta x)/\xi$ можно не отличить от нормального логнормальное распределение ошибок. Этим же объясняется то, что именно для экспрессных методов, для которых $\sigma(\Delta x)$ сравнительно велико, при прежнем подходе наиболее четко было замечено неподчинение ошибок нормальному распределению (Мищенко, 1965, и др.).

Для более строгой оценки закона распределения ошибок может быть использован следующий метод, основывающийся на П. 5 (§ 3, гл. I).

Пусть известны совокупности $\{x_i\}$ оценок измеряемых концентраций, полученные при не менее чем двукратном анализе большого числа проб выбранным методом. Отложим по оси абсцисс первые (либо вторые, либо третьи и т. д.) результаты измерений. Очевидно, что они положительно коррелированы с ξ . По оси ординат отложим средние абсолютные отклонения x от ξ или средние абсолютные расхождения результатов измерений (средние для каждого из измеренных значений ξ в отдельности). Если эти отклонения систематически значимо меняются вдоль оси абсцисс, то на основании п. 5 (§ 3, гл. I) распределение ошибок в диапазоне измерений несимметрично. Тогда целесообразно найти симметризирующую функцию $u(x) \in U_z$. Эта функция подбирается по признаку отсутствия корреляции между величинами $|\Delta u(x)|$ и ξ по такому же принципу, который был указан для проверки симметричности распределения значений Δx . Дополнительные сведения о форме закона распределения значений $\Delta u(x)$ для найденной функции могут быть получены построением распределения $p(\Delta u(x))$. Поскольку оно не зависит от ξ , то для его оценки можно использовать все значения $\Delta u(x)$, известные для разных ξ , т. е. при известных ξ это построение бывает возможно тогда, когда не хватает данных для оценки распределения значений Δx и $\Delta u(x)$ при одном ξ . Если же достаточно точные оценки значения ξ неизвестны, то форма $p(\Delta u(x))$ оценивается путем многократного измерения заведомо одной величины (например, концентрации в одной пробе) с построением $p(u(x))|\xi$. Некоторые сведения о форме $p(\Delta u(x))$ могут быть получены и из соотношения различных статистических параметров, вычисляемых по расхождениям значений $u(x)$, например по соотношению оценок средней абсолютной и средней квадратической погрешностей; они могут быть получены и при неизвестных ξ , что более подробно обсуждается ниже.

На рис. 6 в качестве примера показаны кривые зависимости средних абсолютных расхождений для x и $\lg x$, полученные при двукратном экспрессном спектральном анализе геохимических проб на вольфрам. В качестве x здесь выступает оценка концентрации C . Как видим, средние абсолютные расхождения значений C растут с увеличением измеряемой величины, а средние абсолютные расхождения значений $\lg C$ при этом практически не меняются в исследованном диапазоне измерений, т. е., согласно изложенным положениям, логарифмическая функция является здесь симметризирующей.

Аналогичные кривые были получены при спектральном анализе на свинец, медь, молибден, полярографическом анализе на свинец и медь, а также при колориметрическом — на молибден. Во всех этих случаях отношение $\sigma(\Delta \lg x)/|\Delta \bar{\lg}(x)|$ находилось в пределах $1,23 \div 1,27$, не отличаясь существенно от характерного для нормального распределения отношения $\sigma/|\bar{\Delta}| = \sqrt{\pi}/2 \approx 1,25$. Поэтому, учитывая физические соображения и требуемую точность аппроксимации, закон распределения ошибок всех этих видов анализа принимается далее логнормальным. Для спектрального анализа это подтверждено и известными в упоминавшейся литературе исследованиями формы $p(\Delta x)$ при различных ξ . Заметим, что показанная независимость $\Delta \lg x$ от ξ при принятой малости действия каждого из большого числа случайных факторов F_i в

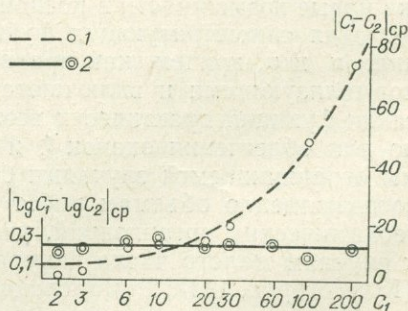


Рис. 6. Расхождения результатов двукратного спектрального анализа 99 проб на вольфрам (данные автора). C_1 и C_2 — концентрации, зафиксированные соответственно при первой и второй сериях измерений. 1 — фактические данные и сглаженная кривая средних абсолютных расхождений оценок концентраций; 2 — то же, для логарифмов концентраций.

отдельности, согласно п. 5 (§ 3, гл. I), уже достаточна для заключения о распределении $\Delta \lg x$ по нормальному (точнее, асимптотически-нормальному) закону с соответствующим этим построениям приближением, т. е. о приближенно логнормальном распределении ошибок рассматриваемого метода измерений. Организуя же проверку формы распределения для отдельных значений ξ так, как это было указано в п. 6 (§ 3, гл. I), можно показать приближенную логнормальность распределения ошибок в рассматриваемых случаях и без сделанного предположения о числе случайных факторов и величине их действия.

Если истинные концентрации известны, то при оценке $K(|\Delta u(x)|, \xi)$ можно обойтись однократными измерениями. Однако, сопоставляя x и ξ , необходимо учитывать возможность изменения от пробы к пробе систематической ошибки, связанной с их составом. В предыдущем случае, при сопоставлении лишь значений x , полученных одним методом, эта ошибка входит одинаково во всех $u(x)$ и $\bar{u}(x)$ для каждой отдельной пробы и поэтому не изменяет среднего расхождения.

В дополнение к сказанному по поводу применения п. 5 (§ 3, гл. I) заметим, что при отсутствии систематической ошибки и любом законе распределения значений Δx для значений x_1 и x_2 , полученных при разных сериях измерений одной величины ξ , явления $x_1 - x_2 = a$ и $x_2 - x_1 = a$ имеют одинаковую плотность вероятности. Поэтому в таких случаях распределение разностей $x_1 - x_2$ является симметричным при несимметричных распределениях значений Δx . Наличие же систематической ошибки сказывается на распределении значений $x_1 - x_2$ по-разному в зависимости от вида распределений значений Δx . Поэтому встречающееся на практике суждение о законе распределения ошибок Δx только по распределению разностей $x_1 - x_2$ является грубо ошибочным.

Теория ошибок, базировавшаяся на постулате Гаусса, справедлива для случаев, когда операторы F_i единообразны и имеют только один вид, выражаясь в прибавлении к x_{i-1} случайной величины Δx_i . Излагаемые же ниже положения выведены для операторов F_i широкого класса видов с требованием их единообразия лишь в пределах одной совокупности $\{F_i\}$. Следующим желательным шагом, очевидно, следует считать разработку теории для случая, когда в $\{F_i\}$ входят не единообразные операторы.

Применение нормализующих функций позволяет в названном относительно общем случае применить теорию, уже разработанную ранее для нормального распределения ошибок. Использование методов измерений с различными законами распределения ошибок открывает также новые возможности в познании действительности.

Для симметризирующих функций далее используются два обозначения: u и v , причем, как правило, предполагается, что они являются нормализующими и включаются в класс U_z . Как указывалось, подбор таких функций практически всегда возможен (см. § 3, гл. I), и это важно для облегчения оценок ξ и дисперсионного анализа. Для простоты мы ограничиваемся случаями большого числа измерений (наблюдений), соответственно объемам работ современных мощных производственных геохимических организаций, учитывая известность способов перехода к случаям малого числа измерений, к так называемой микростатистике (Колмогоров, 1942; Романовский, 1947; и др.)

Излагаемые ниже положения теории ошибок предполагают отсутствие специфических субъективных искажений, связанных с предубеждением. Например, при концентрации около 100% у многих элементов имеются ненасыщенные спектральные линии, интенсивность которых из-за воздействия F колеблется от опыта к опыту, т. е. имеются как занижения, так и завышения по сравнению с характерной интенсивностью. Соответственно занижениям интенсивности линий производятся и занижения в оценке измеряемой концентрации. В случаях же завы-

шения интенсивности линий обычно не дается соответствующей завышенной оценки концентрации исходя из того, что больше 100% концентрация не может быть. Но тогда среднее из многократных измерений оказывается заниженным. Подобное явление наблюдается довольно часто в менее очевидных случаях, когда по мнению аналитика маловероятны сравнительно низкие или высокие концентрации. Такие ошибки основаны на неправильном подсознательном отождествлении распределений ξ и x . Чтобы не делать искажений, необходимо фиксировать те оценки, которые наблюдаются, а не те, которые должны были бы быть по мнению исследователя.

К большим субъективным искажениям оценок фактических ошибок (иногда в несколько раз) ведет знание исполнителями, какие из величин являются контрольными: внимание к ним невольно меняется.

Приводимые здесь и ниже положения о погрешностях излагались автором в лекциях (Дубов, 1963₄), обсуждались на Втором Сибирском совещании по спектроскопии в 1963 г. (Дубов, 1967₁), затем на некоторых других совещаниях (Дубов, 1964₃, 1966₃, 1968₁, 1968₂), отчасти они были использованы в «Инструкции по геохимическим методам поисков рудных месторождений» (1965); эти положения прошли проверку в ряде производственных организаций, занимающихся геохимией. Поэтому автор надеется, что их использование вместо классических положений достаточно оправданно. В данной работе они излагаются в существенно уточненном виде по сравнению с прежними публикациями, со значительными дополнениями.

§ 2. ДИСПЕРСИОННЫЙ АНАЛИЗ И КОНТРОЛЬ ИЗМЕРЕНИЙ

Систематические погрешности и расхождения

Пусть для выявления погрешностей в состав анализируемых проб в равномерно-случайном порядке включены рабочие (контрольные) эталоны с известными концентрациями μ . Дешифрируя их после измерений, нетрудно найти характерную для F систематическую погрешность Δ_c значений симметризирующей функции как оценку величины $M(\Delta u(x))$: по определению,

$$\Delta u_c(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (u(x_i) - u(\xi_i)) = \frac{1}{n} \left[\sum_{i=1}^n u(x_i) - \sum_{i=1}^n u(\xi_i) \right], \quad (1)$$

где n — общее число измерений, x_i — результат измерения величины ξ_i (при кратных измерениях все или некоторые из этих величин могут быть одинаковыми).

Если обозначить через ξ_i только разные измеряемые величины (соответствующие разным пробам при вещественном анализе), через m_i — число измерений величины ξ_i (кратность вещественного анализа), n — число элементов в $\{\xi_i\}$ (число проб), x_{ij} — результат j -го измерения i -й величины, то вместо формулы (1) можно написать:

$$\Delta_c u(x) = \frac{1}{\sum_{i=1}^n m_i} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{m_i} (u(x_{ij}) - u(\xi_i)).$$

Обратим внимание на то, что в этой формуле придается одинаковый статистический вес всем результатам измерений.

Если для одного значения ξ_i при m измерениях вычисляется

$$\Delta_c u(x) = \frac{1}{m} \cdot \sum_{i=1}^m (u(x_i) - u(\xi_i)),$$

то при придании всем таким значениям одинакового статистического веса независимо от кратности измерений для n разных значений ξ_i получаем:

$$\Delta_c u(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{m_i} (u(x_{ij}) - u(\xi_i))^*.$$

При $m_i = \text{const}(i)$ оба подхода дают, разумеется, одинаковые результаты.

Можно найти наглядное выражение погрешности непосредственно для значений x . Для этого вычисляется величина $u^{-1}(\Delta_c u(x))$. В частности, при $u(x) = \lg(x)$, согласно (1),

$$\Delta_c = \Delta_c u(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\lg x_i - \lg \xi_i) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lg \frac{x_i}{\xi_i}, \quad (2)$$

т. е.

$$\Delta_c = \lg \left(\prod_{i=1}^n \frac{x_i}{\xi_i} \right)^{1/n} = \lg \sqrt[n]{\prod_{i=1}^n \frac{x_i}{\xi_i}}.$$

Беря антилогарифм, находим отсюда величину $u^{-1}(\Delta_c)$, которую обозначим особо:

$$\delta_c = \text{ant}(\Delta_c) = \sqrt[n]{\prod_{i=1}^n \frac{x_i}{\xi_i}} \quad (3)$$

— среднее (геометрическое) систематическое относительное отклонение результатов измерений от истинных значений.

Исключение определенной таким образом систематической ошибки из результатов измерений (x) производится их делением на δ_c .

Вместо δ_c можно оперировать с более привычной по названию величиной — систематической относительной погрешностью в процентах:

$$\delta'_{c\%} = (\delta_c - 1) \cdot 100\% \quad (4)$$

Заметим, что она не равна распространенной одноименной погрешности, обычно вычисляемой по формуле типа

$$\delta_{c\%} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|x_i - \xi_i|}{\xi_i} \cdot 100\% \quad (5)$$

На основании изложенного вполне очевидно, что оценка по формуле (5) не удовлетворяет требованиям к характеристикам ошибок. Действительно, как было показано, оценка δ_c , определяемая формулой (3), правильно отражает искажающие факторы. Ее несложно использовать для введения поправки. К ней легко сводится и оценка $\delta'_{c\%}$, определяемая формулой (4). Оценка же $\delta_{c\%}$, определяемая формулой (5), не равна предыдущей и не сводится непосредственно к ней, т. е. она неправильна.

Как известно, особое значение имеют систематические погрешности, связанные с природой измеряемых величин. Для их исключения при вещественном анализе проб обычно рекомендуется применять эта-

* Одинаковый статистический вес таким неравноточным величинам бывает нужно приписывать, например, при изучении различных природных объектов, когда придание большего веса тем из них, которые больше изучались, нарушает природные соотношения. Строго говоря, необходимо некоторое промежуточное решение, но оно пока не разработано в нужной мере.

лоны того же состава, что и пробы. Однако в действительности строгое соблюдение такого правила невозможно, так как состав пробы можно узнать только после ее вещественного анализа. Кроме того, число возможных сочетаний различных по величине концентраций разных элементов бесконечно велико, и бывают случаи, когда даже относительно небольшие изменения состава проб приводят к существенным искажениям результатов их вещественного анализа (Вайнштейн, Павленко, 1958, и др.). Предусмотреть все это заранее, приготовить и использовать соответствующие эталоны немислимо. Необходим способ оценки концентраций при конечном числе используемых эталонов с численным исключением Δ_c . Это можно сделать следующим образом.

К вопросу об исключении систематических погрешностей следует подходить статистически: множество проб должно быть разбито на подмножества, для каждого из которых с нужной надежностью находится способ вычисления оценки систематической ошибки с заданной точностью. От полного детерминистического определения всех зависимостей нужно отказаться: оно невозможно. Если при разбиении множества проб по некоторому признаку получаются подмножества с недостаточной точностью вычисления систематической погрешности, то такие подмножества, в свою очередь, рассматриваются как множества, подлежащие разбиению по этому же или иному признаку, который нужно искать.

В качестве исходного можно принять разбиение горных пород по литологическим признакам. При этом группы пород, для которых оценки систематической погрешности различаются мало (при заданной точности), объединяются в одно подмножество.

Может показаться, что для решения поставленной задачи необходимо знание зависимости поправки к оценке концентрации μ от истинных концентраций мешающих элементов. В этом направлении были многие исследования. Однако в аналитической практике такие зависимости непосредственно не могут дать правильного результата, так как концентрации мешающих элементов в пробах узнаются тоже по измерениям с какими-то систематическими ошибками, зависящими от неизвестного действительного соотношения различных элементов.

Поэтому решение задачи заключается в установлении соответствия между «истинной» концентрацией μ и оценками концентраций, получаемыми выбранным методом измерений для μ и мешающих элементов. Это резко упрощает исследования. В частности, при приготовлении наборов эталонов для установления нужных соответствий достаточно добавлять μ в известных концентрациях в различные горные породы без точного знания концентраций остальных элементов.

Теперь оказывается возможным производить вещественный анализ проб с одним набором эталонов стандартного состава, для которого найдены необходимые соответствия.

Если предварительными исследованиями установлено, что мешающие элементы относятся к пороодообразующим и их концентрация обусловливается названием горной породы, то влияние этих элементов может определяться по такому названию.

Пример. В табл. 2 приведено вычисление систематических ошибок при экспрессном спектральном анализе проб из различных горных пород, опознаваемых геологически до анализа или по спектрограммам*.

Для контроля вычислений используются левая и правая части последнего равенства выражения (1): сумма в графе 6 должна быть равна разности сумм в графах 5 и 3; сумма в графе 11 должна быть равна разности сумм в графах 10 и 3. Под таблицей приведены значения Δ_c .

* В этой и других таблицах число значащих цифр не соответствует обычным представлениям, что будет специально обсуждаться далее.

Сопоставление влияния различного основного состава проб на результаты спектрального анализа на олово

| i | $\xi_i, 10^{-3} \%$ | $\lg \xi_i$ | Пробы, изготовленные на известняке | | | | Пробы, изготовленные на песчанике | | | | | |
|----|---------------------|-------------|------------------------------------|-----------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-------------------|-----------|-----------------------------------|-----------------------------------|--------------|
| | | | $x_i, 10^{-3} \%$ | $\lg x_i$ | $\Delta'_i = \lg x_i - \lg \xi_i$ | $\Delta_i = \Delta'_i - \Delta_c$ | Δ_i^2 | $x_i, 10^{-3} \%$ | $\lg x_i$ | $\Delta'_i = \lg x_i - \lg \xi_i$ | $\Delta_i = \Delta'_i - \Delta_c$ | Δ_i^2 |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 |
| 1 | 10 | 1,0 | 100 | 2,000 | 1,000 | 0,159 | 0,0252 | 30 | 1,477 | 0,477 | -0,012 | 0,0001 |
| 2 | 30 | 1,477 | 300 | 2,477 | 1,000 | 0,159 | 0,0252 | 100 | 2,000 | 0,523 | 0,034 | 0,0012 |
| 3 | 100 | 2,000 | 1000 | 3,000 | 1,000 | 0,159 | 0,0252 | 400 | 2,602 | 0,602 | 0,113 | 0,0129 |
| 4 | 300 | 2,477 | 3000 | 3,477 | 1,000 | 0,159 | 0,0252 | 1000 | 3,000 | 0,523 | 0,034 | 0,0012 |
| 5 | 1000 | 3,000 | 5000 | 3,699 | 0,699 | -0,142 | 0,0202 | 3000 | 3,477 | -0,477 | -0,012 | 0,0001 |
| 6 | 3000 | 3,477 | 10000 | 4,000 | 0,523 | -0,318 | 0,1011 | 5000 | 3,699 | 0,222 | -0,267 | 0,0708 |
| 7 | 1 | 0,000 | 20 | 1,301 | 1,301 | 0,46 | 0,2116 | 10 | 1,000 | 1,000 | 0,511 | 0,2621 |
| 8 | 3 | 0,477 | 80 | 1,903 | 1,426 | 0,585 | 0,3422 | 15 | 1,176 | 0,699 | 0,210 | 0,0445 |
| 9 | 10 | 1,000 | 100 | 2,000 | 1,000 | 0,159 | 0,0252 | 25 | 1,398 | 0,398 | -0,091 | 0,0081 |
| 10 | 30 | 1,477 | 150 | 2,176 | 0,699 | -0,142 | 0,0202 | 50 | 1,699 | 0,222 | -0,267 | 0,0708 |
| 11 | 100 | 2,000 | 400 | 2,602 | 0,602 | -0,239 | 0,0571 | 300 | 2,477 | 0,477 | -0,012 | 0,0001 |
| 12 | 300 | 2,477 | 2000 | 3,301 | 0,824 | 0,017 | 0,0002 | 1000 | 3,000 | 0,523 | +0,034 | 0,0012 |
| 13 | 1000 | 3,000 | 3000 | 3,477 | 0,477 | -0,364 | 0,1324 | 3000 | 3,477 | 0,477 | -0,012 | 0,0001 |
| 14 | 3000 | 3,477 | 5000 | 3,699 | 0,222 | -0,619 | 0,3832 | 5000 | 3,699 | 0,222 | -0,267 | 0,0708 |

| | | | | | | | |
|----------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|-------|
| Σ | 27,339 | 39,112 | 11,773 | 1,3952 | 34,181 | 6,842 | 0,544 |
|----------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|-------|

$$\Delta_c = \frac{1}{14}(39,112 - 27,339) = \frac{1}{14} \cdot 11,773 = 0,841; D(\Delta) = \frac{1}{26} \cdot 1,395 = 0,054;$$

$$D(\Delta_c) = \frac{1}{14} \cdot 0,054 = 0,0038; \sigma = \sqrt{0,0038} = 0,0617; \delta_c = 6,94 \cdot 1,15^{\pm 1}$$

$$\Delta_c = \frac{1}{14}(34,181 - 27,339) = \frac{1}{14} \cdot 6,842 = 0,489; D(\Delta) = \frac{1}{26} \times 0,544 = 0,021;$$

$$D(\Delta_c) = \frac{1}{14} \cdot 0,021 = 0,0015; \sigma(\Delta_c) = \sqrt{0,0015} = 0,0387;$$

$$\delta_c = 3,08 \cdot 1,09^{\pm 1}$$

Примечание. Интерпретация спектрограмм проб производилась сопоставлением со спектрограммами эталонов, изготовленных на угольном порошке. Олово вводилось в пробы в виде касситерита.

и δ_c с указанием точности их нахождения. Об оценках этой точности, основывающихся на вычислении случайных ошибок, будет сказано в следующем разделе.

После установления такого большого различия δ_c для исследуемых проб, какое зафиксировано в табл. 2, естественно поставить подобные исследования для проб промежуточного состава, например известковистого песчаника, а затем найти зависимость поправки от соотношения оценок концентраций кремния и кальция — основных элементов, определяющих этот состав, и т. д.

Существенное влияние на результаты измерений может оказать и тип химического соединения (или минерала), в виде которого содержится μ в пробе. Например, нами наблюдалась примерно одинаковая интенсивность спектральных линий вольфрама при анализе проб, содержащих его только в виде вольфрамита или только в виде шеелита, если во втором случае концентрация в действительности была в 1,5—2 раза меньше, чем в первом.

Перед вычислением систематической ошибки, связанной с составом проб, из результатов измерений должна быть исключена систематическая ошибка, связанная с изменением условий измерений. Нахождение систематических ошибок, связанных с изменениями условий измерений, общими для всех проб, не составляет принципиальной трудности. Для этого достаточно включить в число проб зашифрованные эталоны и вычислить по соответствующим формулам различие между известными для них истинными концентрациями и полученными оценками. Поэтому на исключении таких ошибок мы не останавливаемся.

Для контроля правильности оценки систематической погрешности, а также для ее вычисления при тех же условиях, которые заранее не изучены (например, при необходимости вещественного анализа горных пород, состав которых выходит за границы исследованной области), требуется сопоставление результатов разных методов. Проанализируем возможности такого сопоставления.

Пусть x и y — результаты измерений величины ξ соответственно первым и вторым методами; $u(x)$ и $v(y)$ — соответствующие им симметризирующие функции, входящие в класс U_z ; $\Delta u = u(x) - u(\xi)$, $\Delta v = v(y) - v(\xi)$.

Тогда, по определению,

$$u(\xi) = u(x) - \Delta u; \quad v(\xi) = v(y) - \Delta v. \quad (6)$$

Учитывая, что при фиксированном ξ справедливы равенства $M(u(\xi)) = u(\xi)$ и $M(v(\xi)) = v(\xi)$, и применяя оператор математического ожидания к равенствам (6), получаем:

$$\begin{aligned} u(\xi) &= M(u(x)) - M(\Delta u); \quad v(\xi) = M(v(y)) - M(\Delta v); \\ \xi &= u^{-1}(M(u(x)) - M(\Delta u)) = v^{-1}(M(v(y)) - M(\Delta v)). \end{aligned} \quad (7)$$

Но, по определению, $M(\Delta u) = \Delta_c u$, $M(\Delta v) = \Delta_c v$, а вместо $M(u(x))$ и $M(v(y))$ можно для практических целей поставить их несмещенные оценки — соответственно $\overline{u(x)}$ и $\overline{v(y)}$. Следовательно, для практических оценок можно, на основании (7), записать:

$$u^{-1}(\overline{u(x)} - \Delta_c u) = v^{-1}(\overline{v(y)} - \Delta_c v). \quad (8)$$

Практически почти всегда в изучаемой совокупности проб можно найти две с заведомо различными (хотя и неизвестными) значениями ξ . Они могут быть изготовлены и из одной пробы различным разбавлением ее. Для двух измеряемых величин, согласно (8), получаем два уравнения:

$$\left. \begin{aligned} u^{-1}(\overline{u(x_1)} - \Delta_c u) &= v^{-1}(\overline{v(y_1)} - \Delta_c v); \\ u^{-1}(\overline{u(x_2)} - \Delta_c u) &= v^{-1}(\overline{v(y_2)} - \Delta_c v), \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

где x_1 и y_1 — оценки, полученные соответственно первым и вторым методами для первой величины, а x_2 и y_2 — для второй. Решая систему (9), найдем две искомые оценки $\Delta_c u$ и $\Delta_c v$.

В частности, если ошибки первого метода распределены логнормально, а второго — нормально, т. е. $u(x) = \lg(x)$, $v(y) = y$, то система (9) сводится к системе

$$\tilde{x}_1/\delta_c = \bar{y}_1 - \Delta_c v; \quad \tilde{x}_2/\delta_c = \bar{y}_2 - \Delta_c v, \quad (10)$$

где \tilde{x}_1 и \tilde{x}_2 — средние геометрические, а \bar{y}_1 и \bar{y}_2 — средние арифметические из соответствующих значений, полученных при многократных измерениях. Эту систему легко получить и непосредственно, учитывая, что при упомянутых законах \tilde{x} завышается или занижается в некоторое число раз, а \bar{y} — на некоторую величину. Решая систему (10), находим:

$$\delta_c = \frac{\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2}{y_1 - y_2}; \quad \Delta_c v = \frac{\tilde{x}_1 \bar{y}_2 - \tilde{x}_2 \bar{y}_1}{x_1 - x_2}. \quad (11)$$

После нахождения δ_c и $\Delta_c v$ можно вычислить несмещенные оценки измеряемых величин через x и δ_c или y и $\Delta_c v$:

$$\xi_1 = \tilde{x}_1/\delta_c = \bar{y}_1 - \Delta_c v; \quad \xi_2 = \tilde{x}_2/\delta_c = \bar{y}_2 - \Delta_c v. \quad (12)$$

Пусть, например, при спектральном анализе двух проб найдены $\tilde{x}_1 = 0,17\%$ и $\tilde{x}_2 = 2,11\%$, а при весовом химическом — $\bar{y}_1 = 0,190\%$ и $\bar{y}_2 = 2,562\%$. Подставляя эти значения в равенства (12), получаем: $\delta_c = 0,82$; $\Delta_c v = -0,018\%$; $\xi_1 = 0,208\%$; $\xi_2 = 2,58\%$.

С ростом кратности m точность оценок для Δ_c возрастает из-за подавления случайных ошибок. В частном случае может быть $m=1$, но малые значения m практически применимы лишь тогда, когда случайные ошибки заведомо пренебрежимо малы, либо при большом числе n проб, по которым вычисляются многочисленные оценки Δ_c и находятся наиболее вероятные их значения.

Находя $\Delta_c u$, $\Delta_c v$, ξ_1 и ξ_2 для различных проб и используя аппроксимацию, можно затем установить фактическое непостоянство и функциональную зависимость соответствующих ошибок (и поправок) от ξ .

Изложенное означает неправильность современной практики оценки концентраций в широко распространенных сейчас эталонах, приготовленных из рудных концентратов, когда в качестве окончательных принимаются средние арифметические значения из результатов, полученных разными методами.

Данные, приведенные в примере вычислений δ_c и $\Delta_c v$, наглядно показывают, что даже средние из медианных значений, полученных разными методами, могут быть весьма далеки от истины. В частности, ξ_1 там не принадлежит даже интервалу (\tilde{x}_1, \bar{y}_1) , находясь правее него. С изменением ξ изменяется и ошибка таких оценок.

Если одному (известному или неизвестному) значению ξ_i ($i=1, 2, \dots, m$) соответствуют m_{1i} результатов x_{ij} измерений первым методом и m_{2i} результатов y_{ij} измерений вторым методом, то можно вычислить систематическое расхождение значений симметризирующих функций по формуле, непосредственно вытекающей из определения такого расхождения:

$$\Delta_{c,2} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left[\frac{1}{m_{1i}} \sum_{j=1}^{m_{1i}} u(x_{ij}) - \frac{1}{m_{2i}} \sum_{j=1}^{m_{2i}} v(y_{ij}) \right]. \quad (13)$$

Обозначим $\frac{1}{m_{1i}} \sum_{j=1}^{m_{1i}} u(x_{ij})$ через $\overline{u(x_i)}$ и $\frac{1}{m_{2i}} \sum_{j=1}^{m_{2i}} v(y_{ij})$ через $\overline{v(y_i)}$.

Тогда

$$\Delta_{c1,2} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m [\overline{u(x_i)} - \overline{v(y_i)}] = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \overline{u(x_i)} - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \overline{v(y_i)}. \quad (14)$$

Вполне очевидно, что

$$\Delta_{c1,2} = \Delta_{c1} - \Delta_{c2}, \quad (15)$$

где Δ_{c1} — систематическая ошибка значений нормализующей функции для первого метода, а Δ_{c2} — то же для второго метода.

Эти же формулы и выводы могут быть применены для нахождения систематического расхождения результатов двух серий измерений одним методом. Как и ошибка, систематическое расхождение может быть приведено к наглядному виду: если u и v одинаковы, то можно вычислить $u^{-1}(\Delta_{c1,2})$. Например, по двум сериям измерений методом с лог-нормальным распределением ошибок можно найти систематическое от-

носительное отклонение $\delta_{c1,2} = \text{ant}(\Delta_{c1,2}) = \sqrt[n]{\prod_{i=1}^n \frac{x_{i1}}{x_{i2}}}$, где x_{i1} и x_{i2} —

соответственно результаты первой и второй серий измерений. $\delta_{c1,2}$ показывает, во сколько раз результаты первой серии измерений систематически больше результатов второй серии.

При использовании одного метода или разных методов с одинаковыми по форме операторами F нельзя составить системы линейно независимых уравнений для нахождения систематических погрешностей. При отсутствии сведений о значении систематической погрешности хотя бы одной из серий измерений можно вычислить лишь расхождения и утверждать, на основании равенства (15), что по меньшей мере одна из величин Δ_{c1} и Δ_{c2} (или каждая из них) не меньше, чем $\Delta_{c1,2}/2$, верхний же предел систематических ошибок остается тогда неясным даже при $\Delta_{c1,2} = 0$. Поэтому для решения часто возникающих вопросов о систематических погрешностях целесообразно поставить специальные исследования по выявлению пар методов, наиболее отличающихся по законам распределения ошибок измерений.

Дисперсии и случайные погрешности

Если x_i — результат измерения известной величины ξ_i и общее число результатов равно n , то, по определению дисперсии,

$$D(\Delta u(x)) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\Delta u(x_i) - \overline{\Delta u(x)})^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (u(x_i) - u(\xi_i) - \Delta_c)^2, \quad (16)$$

где Δ_c определяется так, как было указано выше. Как и в формуле (1), некоторые (или все) ξ_i могут быть одинаковыми. Все измерения предполагаются здесь равноточными.

Для одного значения ξ при m -кратных измерениях

$$D(\Delta u(x)) = \frac{1}{m-1} \sum_{j=1}^m (u(x_j) - u(\xi) - \Delta_c)^2. \quad (17)$$

С другой стороны, правая часть равенства (17) есть, по определению, дисперсия величины $u(x)$. Следовательно, если значения $u(x_j)$ относятся к одной величине ξ , то $D(\Delta u(x)) = D(u(x))$. Это равенство будет использоваться без оговорок для получаемых далее важных соотношений.

Если изучается средняя дисперсия для n объектов (для каждого из которых может быть свое значение Δ_c) и каждому из них придается одинаковый статистический вес, то, как следует из (17), вычисления

можно производить по формуле

$$D(\Delta u(x)) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m_i - 1} \sum_{j=1}^{m_i} (u(x_{ij}) - u(\xi_i) - \Delta_{ci})^2, \quad (18)$$

где

$$\Delta_{ci} = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{m_i} (u(x_{ij}) - u(\xi_i)).$$

Если значения ξ_i неизвестны, то при m -кратных измерениях одинакового статистического веса для одного объекта дисперсию можно вычислить по формуле

$$D(\Delta u(x)) = \frac{1}{m-1} \sum_{j=1}^m (u(x_j) - \overline{u(x)})^2. \quad (19)$$

Тогда при n объектах среднее для них значение дисперсии определяется формулой

$$D(\Delta u(x)) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m_i - 1} \sum_{j=1}^{m_i} (u(x_{ij}) - \overline{u(x_i)})^2. \quad (20)$$

В формуле (20) каждому из объектов придается одинаковый статистический вес. Если же этот вес принимается пропорциональным m_i , то получаем формулу

$$D(\Delta u(x)) = \frac{1}{\sum_{i=1}^n m_i} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{m_i - 1} \sum_{j=1}^{m_i} (u(x_{ij}) - \overline{u(x_i)})^2.$$

Обратим внимание на различие формул вычисления дисперсии в зависимости от цели исследований, что далеко не всегда учитывается. Эти формулы применимы не только к ошибкам измерений, но и к отклонениям в широком смысле, в частности при изучении различных проявлений природных процессов. Например, разным ξ могут соответствовать разные опробуемые интрузивы или другие геологические образования, а величинам x — концентрации химических элементов в совокупностях проб, отбираемых из разных мест таких объектов.

Пользуясь известными соотношениями, по величинам дисперсий можно вычислить соответствующие средние квадратические, средние абсолютные и вероятные отклонения или ошибки. Для определенности мы будем далее говорить об ошибках измерений, хотя соответствующие формулы применимы и к отклонениям, не связанным с измерениями.

Заметим, что в отличие от Δ_c случайные погрешности могут быть оценены, соответственно величине $D(\Delta u(x))$, по расхождениям результатов одного метода при неизвестных истинных значениях измеряемых величин. В то же время они являются такими статистическими характеристиками, которые нельзя исключить из каждого отдельного результата, как это можно было сделать в отношении Δ_c .

На практике часто приходится вычислять как систематические расхождения, так и случайные погрешности по результатам измерений, проводимых в различное время разными исполнителями. Обычно одни из результатов принимаются в качестве контрольных, и расхождения с ними считаются оценками ошибок других результатов. Однако в действительности расхождения обуславливаются ошибками обоих сравниваемых результатов, причем ошибки контроля могут быть больше ошибок контролируемых измерений.

Ниже дается способ раздельного вычисления случайных погрешностей для случая, когда симметризирующие функции ошибок сравниваемых методов одинаковы.

Пусть каждой из величин ξ_i ($i=1, 2, \dots, n$) соответствует результат x_{1i} в первой серии измерений и x_{2i} — во второй. Поскольку $u(x_1) = u(\xi) + \Delta u(x_1)$, $u(x_2) = u(\xi) + \Delta u(x_2)$, то $u(x_1) - u(x_2) = \Delta u(x_1) - \Delta u(x_2)$. Тогда, согласно известной теореме о дисперсии суммы и разности случайных величин,

$$\left. \begin{aligned} D(u(x_1)) &= D(u(\xi)) + D(\Delta u(x_1)); & D(u(x_2)) &= D(u(\xi)) + D(\Delta u(x_2)); \\ D(u(x_1) - u(x_2)) &= D(\Delta u(x_1)) + D(\Delta u(x_2)). \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Величины $D(u(x_1))$, $D(u(x_2))$, $D(u(x_1) - u(x_2))$ вычисляются непосредственно по результатам измерений.

Решая систему (21), находим неизвестные дисперсии:

$$\left. \begin{aligned} D(\Delta u(x_1)) &= 1/2 [D(u(x_1)) - D(u(x_2)) + D(u(x_1) - u(x_2))]; \\ D(\Delta u(x_2)) &= 1/2 [D(u(x_2)) - D(u(x_1)) + D(u(x_1) - u(x_2))]; \\ D(u(\xi)) &= 1/2 [D(u(x_1)) + D(u(x_2)) - D(u(x_1) - u(x_2))]. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Напомним, что здесь $D(u(\xi))$ есть природная дисперсия лишь для той выборки, которая подвергнута двум сериям измерений. Если выборка является неравномерной или непредставительной по объему, то значение $D(u(\xi))$ в ней может весьма отличаться от $D(u(\xi))$ для генеральной совокупности величин ξ . Дисперсии же ошибок, найденные указанным образом, не зависят от распределения ξ в данной выборке. Поэтому природная дисперсия величин ξ в генеральной совокупности, подвергнутой измерениям только одной из серий, может быть найдена как результат вычитания значения $D(\Delta u(x))$, полученного при решении системы (22), из общей дисперсии значений $u(x)$, полученных для генеральной совокупности.

Поскольку все величины, входящие в правые части равенств системы (22), находятся с определенными ошибками, то с ошибками вычисляются и искомые дисперсии. Если эти ошибки больше величин искомым дисперсий, то вычисленные таким образом оценки последних могут быть как положительными, так и отрицательными, хотя истинные значения дисперсий отрицательными быть не могут.

При практической проверке описываемого способа выявилось затруднение, связанное с одним весьма распространенным проявлением субъективизма — наличием различной для разных исполнителей корреляции между тщательностью измерений (величиной ошибок $\Delta u(x)$) и наблюдаемой величиной x . Даже у одного исполнителя эта корреляция может меняться. Для строгого же применения обсуждаемых формул необходимо отсутствие такой корреляции. Требуемое снижение ее достигается после нескольких проверок результатов измерений определенного исполнителя в разных частях диапазона измеряемых величин с указанием, в каких частях точность измерений недостаточна.

Несколько менее чувствительна к названным осложнениям схема вычисления дисперсии погрешностей, в которой не участвуют общие дисперсии с относительно большими абсолютными ошибками их оценки. Такая схема возможна при сравнении результатов трех и более серий измерений (при арбитражных измерениях, сопоставлении результатов ряда методов, исполнителей или лабораторий и т. д.).

Действительно, пусть $l=1, 2, \dots, L$ — номер серии измерений. Тогда $u(x_l) = u(\xi) + \Delta u(x_l)$. Отсюда для любых неодинаковых $l=p$ и $l=q$ имеем: $u(x_p) - u(x_q) = \Delta u(x_p) - \Delta u(x_q)$. Применяя к обеим частям этого равенства оператор дисперсии и придавая p и q различные возможные

значения, получаем систему уравнений:

$$\{D(u(x_p) - u(x_q)) = D(\Delta u(x_p)) + D(\Delta u(x_q))\}. \quad (23)$$

Число уравнений в ней равно числу сочетаний из L по 2, т. е. при $L=3$ эта система содержит число уравнений, равное числу неизвестных (L). При $L>3$ число уравнений больше числа неизвестных, и каждое из неизвестных можно оценивать как среднее из значений, получаемых из разных подсистем уравнений (если каждой из них придавать одинаковый статистический вес). Но лучше при этом использовать общую формулу, справедливую при любых L и устраняющую вопрос о необходимом среднем:

$$D(\Delta u(x_l)) = \frac{1}{L-1} \left[\sum_{k \neq l} D(u(x_l) - u(x_k)) - \frac{1}{L-2} \sum_{\substack{p < q \\ p \neq l \neq q}} D(u(x_p) - u(x_q)) \right], \quad (24)$$

где суммирование производится при фиксированном l для всех указанных возможных k, p, q .

Эту формулу легко проверить, превратив в тождество, если учесть, что $D(u(x_l) - u(x_k)) = D(\Delta u(x_l) - \Delta u(x_k)) = D(\Delta u(x_l)) + D(\Delta u(x_k))$ и что под знаком первой суммы в (24) при фиксированном l стоят $L-1$ слагаемых, различающихся номером $k=1, 2, \dots, l-1, l+1, \dots, L$ (в этом ряду нет члена $k=l$).

Согласно сказанному,

$$\begin{aligned} \sum_{k \neq l} D(u(x_l) - u(x_k)) &= \sum_{k \neq l} [D(\Delta u(x_l)) + D(\Delta u(x_k))] = \\ &= (L-1) \cdot D(\Delta u(x_l)) + \sum_{k \neq l} D(\Delta u(x_k)). \end{aligned} \quad (25)$$

Рассмотрим выражение

$$\sum_{p \neq l \neq q} D(u(x_p) - u(x_q)) = \sum_{p \neq l \neq q} [D(\Delta u(x_p)) + D(\Delta u(x_q))], \quad (26)$$

где суммирование производится по всем возможным значениям p и q , не равным l , причем в одном слагаемом всегда $p \neq q$. Тогда в выражении (26) под знаком суммы для каждого p стоят $L-2$ членов, отличающихся только значениями q , меняющимися от 1 до L , исключая значения l и p . Следовательно, в правой части (26) стоят $L-2$ одинаковых члена $D(\Delta u(x_p))$ (для каждого q). Поскольку p и q принимают значения из одной совокупности, то в общей сумме (26) на каждое значение $D(\Delta u(x_p))$ приходится по одному равному ему значению $D(\Delta u(x_q))$. Следовательно, обозначая эти равные значения через $D(\Delta u(x_k))$, вместо (26) можно записать:

$$\sum_{p \neq l \neq q} D(u(x_p) - u(x_q)) = 2(L-2) \cdot \sum_{k \neq l} D(\Delta u(x_k)). \quad (27)$$

С другой стороны, поскольку, в связи со сказанным, на каждый член $D(u(x_a) - u(x_b))$ приходится один член $D(u(x_b) - u(x_a))$, т. е. на каждое сочетание $p=a, q=b$ приходится одно сочетание $p=b, q=a$, то

$$\sum_{p \neq l \neq q} D(u(x_p) - u(x_q)) = 2 \sum_{\substack{p \neq l \neq q \\ p < q}} D(u(x_p) - u(x_q)), \quad (28)$$

где суммируются только члены с $p < q$. Сопоставляя (27) и (28), получаем:

$$\sum_{\substack{p \neq l \neq q \\ p < q}} D(u(x_p) - u(x_q)) = (L-2) \cdot \sum_{k \neq l} D(\Delta u(x_k)). \quad (29)$$

Подставляя выражения (25) и (29) в (24), получаем необходимое тождество.

В частности, при $L=3$, как нетрудно вывести и из исходной системы уравнений (23),

$$\begin{aligned} D(\Delta u(x_1)) &= 1/2 [D(u(x_1) - u(x_2)) + D(u(x_1) - u(x_3)) - D(u(x_2) - u(x_3))]; \\ D(\Delta u(x_2)) &= 1/2 [D(u(x_1) - u(x_2)) + D(u(x_2) - u(x_3)) - D(u(x_1) - u(x_3))]; \\ D(\Delta u(x_3)) &= 1/2 [D(u(x_1) - u(x_3)) + D(u(x_2) - u(x_3)) - D(u(x_1) - u(x_2))]. \end{aligned} \quad (30)$$

В связи с ошибками оценок $D(\Delta u(x))$ для разных серий измерений, естественно, оказываются разными значения природной дисперсии, определяемые из равенств $D(u(\xi)) = D(u(x_i)) - D(\Delta u(x_i))$ для разных i . Из полученных при этом значений $D(u(\xi))$ можно найти медианное, а по отклонениям от него частных значений оценить их ошибки. Различные оценки можно получить и для разных $D(\Delta u(x_i))$, по-разному комбинируя серии результатов измерений.

Далее в качестве расчетных используются формулы:

$$D(u(x_l)) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (u(x_{li}) - \overline{u(x_l)})^2 = \frac{1}{n-1} \left[\sum_{i=1}^n (u(x_{li}))^2 - n (\overline{u(x_l)})^2 \right], \quad (31)$$

где

$$\overline{u(x_l)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n u(x_{li});$$

$$D(u(x_p) - u(x_q)) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (u(x_{pi}) - u(x_{qi}) - \Delta_{cpq})^2, \quad (32)$$

где

$$\Delta_{cpq} = \overline{u(x_{pi}) - u(x_{qi})} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (u(x_{pi}) - u(x_{qi})).$$

Последнюю формулу можно заменить и расчетным вариантом, аналогичным правой части формулы (31):

$$D(u(x_p) - u(x_q)) = \frac{1}{n-1} \left[\sum_{i=1}^n \Delta_{pqi}^2 - n \cdot \overline{\Delta_{pq}}^2 \right] = \frac{1}{n-1} [\Delta_{pqi}^2 - n \cdot \Delta_{cpq}^2] \quad (33)$$

где $\Delta_{pqi} = u(x_{pi}) - u(x_{qi})$.

Стремясь упростить вычисления, на практике часто предпочитают вычислять непосредственно среднюю абсолютную погрешность.

При вычислениях оценки дисперсии ошибок по расхождениям учитывается, что отклонения $u(x)$ от $\overline{u(x)}$ даже при $\Delta_c=0$ в среднем меньше отклонений $u(x)$ от $u(\xi)$, т. е. величин $\Delta u(x)$. Поэтому в формуле (19) производится деление не на m , а на $m-1$. При вычислениях же $|\overline{\Delta}|$ по распространенной формуле типа

$$|\overline{\Delta}| = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m |u(x_j) - \overline{u(x)}|$$

такое смещение не учитывается*. Возможно, это отчасти связано с тем, что указанное смещение при многократных измерениях не всегда заметно.

* Точнее, распространена формула $|\overline{\Delta}| = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m |x_j - \bar{x}|$, но необходимость введения симметризирующей функции $u(x) \in U_z$ уже была выше доказана.

При m -кратных измерениях одной величины ξ несмещенная оценка для средней абсолютной случайной ошибки может быть вычислена по формуле (Маликов, 1949), которая при использовании наших обозначений и при введении симметризирующей функции принимает вид:

$$|\bar{\Delta}| = |\overline{\Delta u(x)}| = \frac{1}{\sqrt{m(m-1)}} \sum_{j=1}^m |u(x_j) - \overline{u(x)}|. \quad (34)$$

Эта сравнительно мало известная формула может быть легко получена из общеизвестных положений следующим образом.

Пусть σ^* и $|\bar{\Delta}|^*$ — соответственно среднее квадратическое и среднее абсолютное отклонения значений $u(x)$ от $\overline{u(x)}$; σ и $|\bar{\Delta}|$ — соответственно аналогичные отклонения значений $u(x)$ от $u(\xi) + \Delta_c$. По определению

$$\sigma^* = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (u(x_j) - \overline{u(x)})^2}, \quad |\bar{\Delta}|^* = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m |u(x_j) - \overline{u(x)}|.$$

Согласно общеизвестным положениям математической статистики,

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (u(x_j) - u(\xi))^2} = \sqrt{\frac{1}{m-1} \sum_{j=1}^m (u(x_j) - \overline{u(x)})^2}$$

и приближенно (в пределе, при $m \rightarrow \infty$, точно)

$$\frac{\sigma}{\sigma^*} = \frac{|\bar{\Delta}|}{|\bar{\Delta}|^*}, \text{ т. е. } |\bar{\Delta}| = |\bar{\Delta}|^* \cdot \frac{\sigma}{\sigma^*} = \frac{1}{\sqrt{m(m-1)}} \sum_{j=1}^m |u(x_j) - \overline{u(x)}|,$$

что и требовалось показать.

Подставляя $\overline{u(x)} = u(\xi) + \Delta_c$, получаем отсюда формулу для случая, когда ошибка вычисляется сравнением зафиксированных при измерениях оценок и известных значений ξ с исключением систематической ошибки:

$$|\overline{\Delta u(x)}| = \frac{1}{\sqrt{m(m-1)}} \cdot \sum_{j=1}^m |u(x_j) - u(\xi) - \Delta_c|. \quad (35)$$

При больших m величина $1/\sqrt{m(m-1)}$ несущественно отличается от $1/m$, и тогда $|\bar{\Delta}| \approx |\bar{\Delta}|^*$. Но часто ошибки оцениваются по двукратному анализу относительно большого числа проб. Тогда отличие $|\bar{\Delta}|$ от $|\bar{\Delta}|^*$ оказывается гораздо более существенным, чем обычно предполагалось. Покажем это.

Выведем формулу для оценки $|\bar{\Delta}|$ по двум сериям измерений с предположительно одинаковой случайной средней абсолютной погрешностью. Согласно (21), при поставленном условии, означаемом $D(\Delta u(x_1)) = D(\Delta u(x_2)) = D(\Delta u(x))$, имеем:

$$D(\Delta u(x)) = 1/2 D(u(x_1) - u(x_2)).$$

Отсюда, учитывая (32), получаем:

$$D(\Delta u(x)) = \frac{1}{2(n-1)} \sum_{i=1}^n (u(x_{1i}) - u(x_{2i}) - \Delta_{c1,2})^2,$$

т. е.

$$\sigma(\Delta u(x)) = \sqrt{\frac{1}{2(n-1)} \sum_{i=1}^n (u(x_{1i}) - u(x_{2i}) - \Delta_{c1,2})^2}. \quad (36)$$

Дисперсия значений $u(x_j)$ относительно их среднего значения (\bar{u} относительно $u(\bar{x})$) при многократных измерениях одной величины равна, по определению,

$$D(\Delta^*u(x)) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (u(x_j) - \bar{u}(x))^2,$$

где $\Delta^*u(x) = u(x) - \bar{u}(x)$.

При $m=2$ отсюда получаем:

$$D(\Delta^*u(x)) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 (u(x_j) - \bar{u}(x))^2 = \frac{1}{4} (u(x_2) - u(x_1))^2.$$

Если x_1 и x_2 — результаты разных серий измерений и между $u(x_1)$ и $u(x_2)$ имеется систематическое расхождение, то оно должно быть исключено. Тогда из последней формулы получаем для каждой i -й измеряемой величины:

$$D(\Delta^*u(x_i)) = \frac{1}{4} (u(x_{1i}) - u(x_{2i}) - \Delta_{c1,2})^2.$$

А в среднем для n измеряемых величин:

$$D(\Delta^*u(x)) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n D(\Delta^*u(x_i)) = \frac{1}{4n} \sum_{i=1}^n (u(x_{1i}) - u(x_{2i}) - \Delta_{c1,2})^2$$

(систематическое расхождение, естественно, одинаково для всех i), т. е.

$$\sigma(\Delta^*u(x)) = \sqrt{\frac{1}{4n} \sum_{i=1}^n (u(x_{1i}) - u(x_{2i}) - \Delta_{c1,2})^2}. \quad (37)$$

Согласно выражениям (36) и (37),

$$\frac{\sigma(\Delta u(x))}{\sigma(\Delta^*u(x))} = \sqrt{\frac{2n}{n-1}}. \quad (38)$$

Среднее абсолютное отклонение значений $u(x_1)$ и $u(x_2)$ от их среднего значения, при исключении систематического расхождения, равно, по определению:

$$\begin{aligned} |\overline{\Delta^*u(x)}| &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{u(x_{1i}) - u(x_{2i}) - \Delta_{c1,2}}{2} \right| = \\ &= \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n |u(x_{1i}) - u(x_{2i}) - \Delta_{c1,2}| \end{aligned} \quad (39)$$

(здесь использовано то, что абсолютная разность $u(x_{1i}) - u(x_{2i})$ при отсутствии систематического расхождения вдвое больше абсолютного отклонения $u(x_{1i})$ или $u(x_{2i})$ от их среднего значения $\frac{u(x_{1i}) + u(x_{2i})}{2}$). Поскольку можно принять

$$\frac{|\Delta u(x)|}{|\Delta^*u(x)|} = \frac{\sigma(\Delta u(x))}{\sigma(\Delta^*u(x))},$$

то, используя выражение (38), получаем:

$$|\Delta u(x)| = \sqrt{\frac{2n}{n-1}} \cdot |\overline{\Delta^*u(x)}| = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot n(n-1)}} \sum_{i=1}^n |u(x_{1i}) - u(x_{2i}) - \Delta_{c1,2}|. \quad (40)$$

При больших n можно считать приближенно $\sqrt{n(n-1)} \approx \sqrt{n^2} = n$.

Тогда

$$|\overline{\Delta u(x)}| \approx \frac{1}{\sqrt{2} \cdot n} \cdot \sum_{i=1}^n |u(x_{1i}) - u(x_{2i}) - \Delta_{c1,2}|. \quad (41)$$

Вычислив оценки погрешностей (и исключив Δ_c), нетрудно по формулам (2, 10 и 11, § 3, гл. I) найти наиболее вероятное значение и границы доверительного интервала нужной надежности для измеряемой величины ξ . В частности, при $u(x) = \lg x$ получаем по этим формулам:

$$\left. \begin{aligned} \lg x &= \overline{\lg x} = \lg \tilde{x}, \\ \lg \xi_{(1)} &= \overline{\lg x} - \frac{k}{\sqrt{m}} \cdot \sigma(\Delta \lg x) = \lg \left(\tilde{x} \cdot \text{ant} \left(-\frac{k}{\sqrt{m}} \cdot \sigma(\Delta \lg x) \right) \right), \\ \lg \xi_{(2)} &= \lg \left(\tilde{x} \cdot \text{ant} \left(\frac{k}{\sqrt{m}} \cdot \sigma(\Delta \lg x) \right) \right), \end{aligned} \right\} \quad (42)$$

где $\xi_{(1)}$ и $\xi_{(2)}$ — границы соответствующего доверительного интервала для ξ . Согласно (42),

$$\xi = \tilde{x}; \quad \xi_{(1)} = \tilde{x} \cdot \delta_{\sigma}^{-k/\sqrt{m}}; \quad \xi_{(2)} = \tilde{x} \cdot \delta_{\sigma}^{k/\sqrt{m}}, \quad (43)$$

где $\delta_{\sigma} = \text{ant}(\sigma(\Delta \lg x))$ — относительное случайное отклонение значений x от истинных значений в сторону завышения или занижения, соответствующее величине σ . Можно аналогично определить величины $\delta_{|\Delta|}$ и δ_E , соответствующие среднему абсолютному и вероятному отклонениям для $u(x)$.

Для пояснения смысла величин δ выведем $\delta_{|\Delta|}$ иным способом. Если заведомо $\Delta_c = 0$ и известны значения ξ_i , то, по определению,

$$|\overline{\Delta u(x)}| = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |u(x_i) - u(\xi_i)|. \quad (44)$$

Подставляя сюда $u(x) = \lg x$, получаем:

$$|\overline{\Delta \lg x}| = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \lg \frac{x_i}{\xi_i} \right| = \lg \sqrt[n]{\prod_{i=1}^n \delta_i}, \quad (45)$$

где

$$\delta_i = \begin{cases} x_i/\xi_i, & \text{при } x_i \leq \xi_i; \\ \xi_i/x_i, & \text{при } x_i > \xi_i. \end{cases}$$

Аналогично величине δ_{σ} введем $\delta_{|\Delta|}$ равенством $\delta_{|\Delta|} = \text{ant}(|\overline{\Delta \lg x}|)$. Тогда, согласно (44),

$$\delta_{|\Delta|} = \sqrt[n]{\prod_{i=1}^n \delta_i}. \quad (46)$$

Таким образом, $\delta_{|\Delta|}$ есть среднее (геометрическое) относительное случайное отклонение результата измерений от истинного значения в сторону завышения или занижения. При неизвестных ξ_i величина $|\overline{\Delta \lg x}|$ оценивается иначе, и вместо (45) получается другая формула, но значение $\delta_{|\Delta|}$ остается тем же по смыслу и несмещенным по величине, если не смещена оценка $|\overline{\Delta \lg x}|$.

В частности, при вычислении $\delta_{|\Delta|}$ по результатам двух серий измерений получаем, согласно (40),

$$\delta_{|\Delta|} = \left(\prod_{i=1}^n (\delta_i/\delta_{c1,2}) \right)^{1/\sqrt{2n(n-1)}}. \quad (46a)$$

Пример подсчета погрешностей спектрального анализа по двукратным измерениям

| i | № анализа | Концентрация, 10 ⁻³ % | | lgC _{1i} | lgC _{2i} | $\Delta_{1,2i} = \lg C_{1i} -$ $-\lg C_{2i}$ | $\Delta_{1,2i} - \Delta_{c1,2}$ | $(\Delta_{1,2i} - \Delta_{c1,2})^2$ | $(\lg C_{1i})^2$ | $(\lg C_{2i})^2$ |
|----|-----------|----------------------------------|-----------------|-------------------|-------------------|-------------------------------------------------|---------------------------------|-------------------------------------|------------------|------------------|
| | | C _{1i} | C _{2i} | | | | | | | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 |
| 1 | 359 | 3 | 2 | 0,477 | 0,301 | 0,176 | 0,066 | 0,004 | 0,228 | 0,091 |
| 2 | 360 | 6 | 2 | 0,778 | 0,301 | 0,477 | 0,367 | 0,135 | 0,605 | 0,091 |
| 3 | 361 | 10 | 3 | 1,000 | 0,477 | 0,523 | 0,413 | 0,170 | 1,000 | 0,228 |
| 4 | 362 | 100 | 60 | 2,000 | 1,778 | 0,222 | 0,112 | 0,013 | 4,000 | 3,160 |
| 5 | 363 | 6 | 3 | 0,778 | 0,477 | 0,301 | 0,191 | 0,036 | 0,605 | 0,228 |
| 6 | 364 | 3 | 3 | 0,477 | 0,477 | 0,000 | -0,110 | 0,012 | 0,228 | 0,228 |
| 7 | 365 | 3 | 3 | 0,477 | 0,477 | 0,000 | -0,110 | 0,012 | 0,228 | 0,228 |
| 8 | 366 | 2 | 3 | 0,301 | 0,477 | -0,176 | -0,286 | 0,082 | 0,091 | 0,228 |
| 9 | 367 | 1 | 3 | 0,000 | 0,477 | -0,477 | -0,587 | 0,345 | 0,000 | 0,228 |
| 10 | 368 | 20 | 10 | 1,301 | 1,000 | 0,301 | +0,191 | 0,036 | 1,695 | 1,000 |
| 11 | 369 | 30 | 30 | 1,477 | 1,477 | 0,000 | -0,110 | 0,012 | 2,108 | 2,108 |
| 12 | 370 | 6 | 6 | 0,778 | 0,778 | 0,000 | -0,110 | 0,012 | 0,605 | 0,605 |
| 13 | 371 | 20 | 20 | 1,301 | 1,301 | 0,000 | -0,110 | 0,012 | 1,695 | 1,695 |
| 14 | 372 | 20 | 20 | 1,301 | 1,301 | 0,000 | -0,110 | 0,012 | 1,695 | 1,665 |
| 15 | 373 | 20 | 10 | 1,301 | 1,000 | 0,301 | 0,191 | 0,036 | 1,695 | 1,000 |
| Σ | | | | 13,747 | 12,099 | 1,648 | -0,002 3,064* | 0,929 | 16,478 | 12,813 |

* Сумма абсолютных значений.

 $\Delta_{c1,2} = 0,110 \pm 0,033$; $\delta_{c1,2} = 1,29 \cdot 1,08^{\pm 1}$; $|\overline{\Delta}| = 0,15$; $\delta_{|\overline{\Delta}|} = 1,38$; $D(\Delta_{1,2}) = 0,0665 \pm 0,016$; $D(\lg C_1) = 0,279 \pm 0,069$; $D(\lg C_2) = 0,218 \pm 0,054$; $D(\Delta_1) \approx 0,0637$; $\sigma(\Delta_1) \approx 0,25$; $|\overline{\Delta_1}| \approx 0,20$; $\delta_{|\overline{\Delta_1}|} \approx 1,58$; $D(\Delta_2) \approx 0,003$; $\sigma(\Delta_2) \approx 0,055$; $|\overline{\Delta_2}| \approx 0,044$; $\delta_{|\overline{\Delta_2}|} \approx 1,11$; $D_w \approx 0,215$; $\sigma_w = 0,46$; $|\overline{\Delta_w}| \approx 0,37$; $\delta_{|\overline{\Delta_w}|} \approx 2,34$.

где $\delta_{c1,2}$ — систематическое относительное расхождение; δ_i равно x_{1i}/x_{2i} или x_{2i}/x_{1i} соответственно при $x_{1i} \geq x_{2i}$ или $x_{1i} < x_{2i}$.

Согласно оценкам погрешностей для $\Delta \lg x$, величины δ показывают, во сколько раз производится случайное завышение или занижение результатов измерений для границ доверительного интервала с определенной надежностью.

В табл. 3 показано вычисление основных характеристик точности при двух сериях однократных измерений на примере результатов рядового и контрольного спектрального анализа на вольфрам. Оба раза анализ проводился по одной методике, одним спектроскопистом, но с разрывом во времени в несколько месяцев. Результаты первого анализа при контроле у исполнителя отсутствовали, но спектроскописту было известно, что он проводит контроль.

Сумма в графе 7 после деления на число измеряемых величин (в данном случае $n=15$) дает величину $\Delta_{c1,2}$. Проверкой правильности этой суммы служит ее равенство разности сумм в графах 5 и 6, $\text{ant}(\Delta_{c1,2}) = \delta_{c1,2}$. В графе 8 помещены расхождения результатов за вычетом $\Delta_{c1,2}$. Сумма величин в этой графе должна отличаться от нуля не более, чем на ошибку округления (в данном случае она равна $-0,002$, что в расчете на одно значение дает пренебрежимо малое искажение). Сумма абсолютных значений тех же величин, согласно формуле (39), после деления на $\sqrt{2 \cdot n(n-1)}$ дает $|\Delta|$; $\text{ant}(|\Delta|) = \delta_{|\Delta|}$. Сумма в графе 9, согласно формуле (32), после деления на $n-1$ дает дисперсию расхождений оценок логарифмов концентраций, т. е. величину $D(\lg C_1 - \lg C_2) = D(\Delta_{1,2})$. Сумма в графе 10 за вычетом величины $n(\lg C_1)^2$ после деления на $n-1$ дает, согласно формуле (31), величину $D(\lg C_1)$; $\lg \bar{C}_1$ для этого находится делением на n суммы в графе 5. Аналогично, используя суммы в графах 11 и 6, находится $D(\lg C_2)$. Подстановкой этих величин в равенства (22) вычисляются дисперсии ошибок первой и второй серий измерений, обозначенные здесь соответственно $D(\Delta_1)$ и $D(\Delta_2)$, а также природная дисперсия, свойственная величинам $\lg \xi$ в контрольной выборке (для отличия от дисперсии в генеральной совокупности она обозначена индексом ω). После этого вычисляются соответствующие значения σ , $|\Delta|$ и $\delta_{|\Delta|}$ для каждой серии измерений в отдельности ($\sigma(\Delta_1)$, $\sigma(\Delta_2)$ и т. д.). В табл. 3 указаны также погрешности их нахождения, что будет освещено в следующем разделе.

Как видим, величина $\delta_{|\Delta|}$, вычисленная как средняя характеристика погрешностей первой и второй серий измерений, занимает промежуточное положение между $\delta_{|\Delta|1}$ и $\delta_{|\Delta|2}$. Хотя таблица служит для иллюстрации вычислений и n здесь невелико (т. е. полученные значения δ могут существенно отличаться от действительных), все же большое различие $\delta_{|\Delta|1}$ и $\delta_{|\Delta|2}$ свидетельствует о явном уменьшении погрешности при проведении контрольных измерений по сравнению с погрешностью рядовых.

В табл. 4 показан пример вычисления погрешностей по результатам трех серий измерений. Обозначения аналогичны обозначениям в предыдущей таблице.

Дисперсии значений $\Delta u(x) = \Delta \lg C$ для разных серий измерений здесь вычисляются только через дисперсии расхождений $\Delta_{1,2} = \lg C_1 - \lg C_2$, $\Delta_{1,3} = \lg C_1 - \lg C_3$, $\Delta_{2,3} = \lg C_2 - \lg C_3$ по равенствам (30). Дисперсии же расхождений вычислялись по формуле (33), не требующей вычитания из каждого (i -го) такого расхождения систематической составляющей. Поэтому здесь отсутствуют графы, аналогичные графе 8 в табл. 3.

Следует предостеречь от наблюдаемого еще на практике отнесения оценок неизмеряемых низких концентраций (записываемых иногда нулями) к «совпадениям» результатов при разных сериях измерений: как

Пример подсчета погрешностей спектрального анализа по трехкратным измерениям

| i | № анализа | Концентрация, 10 ⁻¹ % | | | lg C _{1i} | lg C _{2i} | lg C _{3i} | Δ _{1,2i} | Δ _{1,3i} | Δ _{2,3i} | Δ _{1,2i} ² | Δ _{1,3i} ² | Δ _{2,3i} ² |
|----|-----------|----------------------------------|-----------------|-----------------|--------------------|--------------------|--------------------|-------------------|-------------------|-------------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| | | C _{1i} | C _{2i} | C _{3i} | | | | | | | | | |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 |
| 1 | 77 | 100 | 30 | 30 | 2,000 | 1,477 | 1,477 | +0,523 | +0,523 | 0,000 | 0,274 | 0,274 | 0,000 |
| 2 | 79 | 2 | 200 | 3 | 0,301 | 2,301 | 0,477 | -0,000 | -0,176 | +1,824 | 4,000 | 0,031 | 3,330 |
| 3 | 80 | 2 | 30 | 2 | 0,301 | 1,477 | 0,301 | -1,176 | 0,000 | +1,176 | 1,393 | 0,000 | 1,393 |
| 4 | 81 | 30 | 60 | 6 | 1,477 | 1,778 | 0,778 | -0,301 | +0,699 | +1,000 | 0,091 | 0,488 | 1,000 |
| 5 | 82 | 200 | 30 | 30 | 2,301 | 1,477 | 1,477 | +0,824 | +0,824 | 0,000 | 0,678 | 0,678 | 0,000 |
| 6 | 83 | 100 | 600 | 100 | 2,000 | 2,778 | 2,000 | -0,778 | 0,000 | +0,778 | 0,613 | 0,000 | 0,613 |
| 7 | 112 | 6 | 60 | 100 | 0,778 | 1,778 | 2,000 | -1,000 | -1,222 | -0,222 | 1,000 | 1,493 | 0,0493 |
| 8 | 85 | 2 | 10 | 3 | 0,301 | 1,000 | 0,477 | -0,699 | -0,176 | +0,523 | 0,488 | 0,031 | 0,274 |
| 9 | 86 | 3 | 300 | 150 | 0,477 | 2,477 | 2,176 | -2,000 | -1,699 | +0,301 | 4,000 | 2,887 | 0,091 |
| 10 | 87 | 60 | 20 | 20 | 1,778 | 1,301 | 1,301 | +0,477 | +0,477 | 0,000 | 0,227 | 0,227 | 0,000 |
| Σ | | | | | 11,714 | 17,844 | 12,464 | -6,130 | -0,750 | 5,380 | 11,490 | 6,109 | 6,750 |

$$\Delta_{c1,2} = -0,613; \Delta_{c1,3} = 0,075; \Delta_{c2,3} = 0,538; \delta_{c1,2} = 1/4,1; \delta_{c1,3} = 1/1,119; \delta_{c2,3} = 3,45.$$

$$D(\Delta_{1,2}) = 0,860; D(\Delta_{1,3}) = 0,672; D(\Delta_{2,3}) = 0,428.$$

$$D(\Delta_1) = 0,552; D(\Delta_2) = 0,616; D(\Delta_3) = 0,240.$$

$$\sigma(\Delta_1) = 0,743; \sigma(\Delta_2) = 0,785; \sigma(\Delta_3) = 0,490.$$

$$\delta_{\sigma_1} = 5,53; \delta_{\sigma_2} = 6,1; \delta_{\sigma_3} = 3,1.$$

бы они ни были низки, в случае измерений достаточно высокой чувствительности они могли бы отличаться во сколько угодно раз. Поэтому такие случаи должны учитываться отдельно как результаты, где чувствительность оказалась недостаточной.

Нельзя изымать из подсчетов результаты, расхождения которых после контроля представляются исследователю «незакономерно» большими: поскольку такое изъятие невозможно сделать для рядовых непроконтролированных измерений, то оно нарушает представление о их точности, смещая оценку ошибки в сторону занижения. Для уменьшения влияния возможных «случайных» завышений (и занижений) ошибок можно рекомендовать увеличение числа измерений до того, при котором вычисление оценок погрешностей производится с достаточной точностью. Об определении этой точности будет говориться в следующем разделе.

Для наглядности можно использовать понятие об относительной погрешности в процентах:

$$\delta'_{\sigma\%} = (\delta_{\sigma} - 1) \cdot 100\%; \quad \delta'_{|\Delta|} = (\delta_{|\Delta|} - 1) \cdot 100\%; \quad \delta'_{E\%} = (\delta_E - 1) \cdot 100\%. \quad (47)$$

В то же время отметим, что при тех условиях, при которых она удобна ($\delta = \text{const}(\xi)$) для определенной совокупности \bar{F} , неправильно распространенное суждение о ней, как о характеристике равновероятного завышения или занижения измеряемой величины на определенное число процентов. Действительно, если равновероятны оценки $x_1 = \xi/\delta$ и $x_2 = \xi \cdot \delta$, то соответствующее занижение, равное $\xi - x_1 = \xi(1 - 1/\delta)$, составляет меньшую долю от ξ , чем завышение, равное $x_2 - \xi = \xi \cdot (\delta - 1)$. Например, при $\delta = 1,5$ и $\xi = 100$ имеем $x_1 = 100/1,5 = 66,6(6)$, $x_2 = 100 \times 1,5 = 150$, т. е. завышение производится на 50% (на величину $\delta'_{\%}$, вычисляемую по формулам (47)), а занижение — только на 33,3(3)%. Лишь при $\delta \rightarrow 1$ обычная трактовка приближается к истине (например, при $\xi = 100$ и $\delta = 1,01$ получаем: $x_1 = 101$, $x_2 \approx 99$, т. е. здесь возможные завышение и занижение примерно одинаковы — 1% от ξ).

На практике особенно распространено вычисление ошибок по результатам двух серий однократных измерений. При этом нередко предполагают, что оценкой измеряемой величины ξ_i является среднее арифметическое из полученных для нее результатов, т. е. $\bar{x}_i = \frac{1}{2}(x_{1i} + x_{2i})$.

Отклонение же каждого из этих результатов от указанного среднего, т. е. величина $|x_{1i} - \bar{x}_i| = |x_{2i} - \bar{x}_i| = \frac{1}{2}|x_{1i} - x_{2i}|$, принимается в качестве оценки абсолютной ошибки. Среднее арифметическое из отношений этой оценки к \bar{x}_i для n измеряемых величин принимается как средняя относительная погрешность:

$$\delta'_{\%} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\frac{1}{2}|x_{1i} - x_{2i}|}{\frac{1}{2}(x_{1i} + x_{2i})} \cdot 100\% = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|x_{1i} - x_{2i}|}{x_{1i} + x_{2i}} \cdot 100\%. \quad (48)$$

Часто не учитывается множитель 1/2 в числителе. Тогда получается формула

$$\delta'_{\%} = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|x_{1i} - x_{2i}|}{x_{2i} + x_{1i}}. \quad (49)$$

Такая формула, в частности, используется при многочисленных геофизических измерениях (Инструкция по электроразведке, 1961). Часто

использовали ее и спектроскописты. Иногда вместо множителя 2 в выражении (49) ставят множитель $\sqrt{2}$ (Техническая инструкция по магнитной разведке, 1963).

Согласно сказанному выше, величина $\delta_{\%}^{**}$ является смещенной оценкой при использовании любой из упомянутых формул.

Если x_{1i} и x_{2i} отличаются во много раз, то одной из этих величин можно пренебречь в числителе и знаменателе выражений (48) и (49);

тогда $\frac{x_{1i} - x_{2i}}{x_{1i} + x_{2i}} = \frac{x_{1i}}{x_{1i}} = \frac{x_{2i}}{x_{2i}} = 1$. Отсюда следует, что погрешность $\delta_{\%}^{**}$, вычисленная по формулам (48) и (49), не может превысить соответственно 100 и 200%, как бы ни были велики действительные отличия результатов измерений от истинных величин и между собой. То есть при больших ошибках эти формулы приводят к явному абсурду. Практически почти всегда они существенно занижают роль больших расхождений.

При малых ошибках формулы (48) и (49) позволяют сравнивать качество различных серий измерений, но дают все же существенно искаженные оценки действительной погрешности. Покажем это.

Обозначим

$$\delta^{1*} = \frac{1}{100} \cdot \delta_{\%}^{**} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|x_{1i} - x_{2i}|}{x_{1i} + x_{2i}}.$$

Тогда при малых ошибках, когда можно считать равновероятными отклонения значений x в обе стороны от ξ на одинаковую величину (в предположении чего и выведена формула (48)), найдем соответствующее значение относительного отклонения: поскольку вообще $\delta' = \delta - 1$, то $\delta^* = 1 + \delta'$. Эта величина, как и δ , является оценкой того, во сколько раз в среднем x отличается от ξ .

С уменьшением ошибок (а следовательно, и различий между x_j для одного ξ) все средние из значений x_j совпадают. Тогда величина δ^* , определяемая через средние арифметические значения и отклонения от них, сходится с величиной $\delta_{|\Delta|}^*$, определяемой через средние геометрические значения и соответствующие отклонения от них по формуле $\delta_{|\Delta|}^* = \text{ant}(|\Delta^* \lg x|)$. Согласно (49),

$$\delta^* \rightarrow \delta_{|\Delta|}^* = \text{ant} \left(\frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n |\lg x_{1i} - \lg x_{2i} - \Delta_{c1,2}| \right) = \left(\prod_{i=1}^n (\delta_i / \delta_c) \right)^{1/(2n)}.$$

Сопоставляя это выражение с (46а), получаем:

$$\delta^* \rightarrow (\delta_{|\Delta|}^*)^{V_{(n-1)/(2n)}}; \delta_{\%}^{**} = (\delta^* - 1) \cdot 100\% \rightarrow \left(\delta_{|\Delta|}^{V_{(n-1)/(2n)}} - 1 \right) \cdot 100\%.$$

Как видим, это выражение существенно отличается от $\delta_{|\Delta|}^*$ в (47). Оно является не только смещенной, но и несостоятельной оценкой, так как при $n \rightarrow \infty$ $\delta_{\%}^{**}$ не сходится к $\delta_{|\Delta|}^*$, а стремится к иной величине: $\delta_{\%}^{**} \rightarrow (\delta_{|\Delta|}^{1/\sqrt{2}} - 1) \cdot 100\%$. Упомянувшееся применение $\sqrt{2}$ вместо множителя 2 перед скобками этого выражения тоже не приводит к получению состоятельной оценки.

По аналогичным причинам приходится отказываться и от других оценок погрешностей (например, коэффициента вариации), не учитывающих закона распределения ошибок.

Погрешности оценок погрешностей

Оценки погрешностей измерений (погрешности первого ранга) есть некоторые средние, по числу измерений, статистические характеристики ошибок (средняя абсолютная, средняя квадратическая и т. д.). Поэто-

му точность этих оценок растет, а их погрешности (погрешности второго ранга) убывают с увеличением общего числа исходных данных.

Вычисление погрешностей второго ранга целесообразно в ряде случаев, в частности, когда решается вопрос о достаточности контрольной выборки и надежности результатов контроля, для оценки точности дисперсионного анализа и т. д. Оценка точности вычисления систематической погрешности или систематического расхождения необходима также для решения вопроса о необходимости введения поправок. Эта оценка несложна, в частности для систематического расхождения: поскольку

$$\Delta_{c1,2} = \bar{\Delta}_{1,2}, \text{ то } D(\Delta_{c1,2}) = D(\bar{\Delta}_{1,2}) = \frac{1}{n} \cdot D(\Delta_{1,2}), \text{ где } \Delta_{1,2} = u(x_1) - u(x_2).$$

$$\text{Отсюда находится } \sigma(\Delta_{c1,2}) = \sqrt{D(\Delta_{c1,2})} = \sqrt{\frac{1}{n} D(\Delta_{1,2})}.$$

Точность оценки случайных погрешностей можно относительно легко охарактеризовать, если аппроксимировать нормальным законом распределение величин дисперсий $D(\Delta u)$. Как известно, это основывается на сходимости χ^2 -распределения к нормальному с ростом кратности измерений m . Обычно такая аппроксимация считается удовлетворительной при $m = 20 \div 30$ и более. Тогда приближенно принимается (Вентцель, 1962):

$$D(D(\Delta u(x))) = \frac{2}{m-1} (D(\Delta u(x)))^2. \quad (50)$$

$$\text{Отсюда находится } \sigma(D(\Delta u(x))) = \sqrt{\frac{2}{m-1}} \cdot D(\Delta u(x)).$$

С помощью $\sigma(D(\Delta u(x)))$ (или вычисляемых через нее $|\bar{\Delta}|$ и E) строится доверительный интервал нужной надежности для $D(\Delta u(x))$. Корни из значений границ этого интервала есть значения границ интервала той же надежности для $\sigma(\Delta u(x))$.

При принятом упрощении нетрудно найти и дисперсии оценок дисперсий ошибок измерений, вычисляемых по расхождениям результатов различных серий. В частности, если предполагается, что $D(\Delta u(x_1)) = D(\Delta u(x_2)) = 1/2 D(u(x_1) - u(x_2))$, то применяя к этим равенствам оператор дисперсии, находим:

$$D(D(\Delta u(x_1))) = D(D(\Delta u(x_2))) = 1/4 D(D(u(x_1) - u(x_2))). \quad (51)$$

Поскольку $D(u(x_1) - u(x_2))$ находится по n величинам $u(x_1) - u(x_2)$, то аналогично выражению (50)

$$D(D(u(x_1) - u(x_2))) = \frac{2}{n-1} (D(u(x_1) - u(x_2)))^2.$$

Подставляя это выражение в (51), получаем:

$$D(D(\Delta u(x_1))) = D(D(\Delta u(x_2))) = \frac{1}{2(n-1)} (D(u(x_1) - u(x_2)))^2. \quad (52)$$

Ошибки единичных измерений или расхождения результатов измерений и вычисляемые по ним статистические оценки погрешностей можно рассматривать как новые случайные величины. Применяя к ним соответствующие формулы и приемы оценок обычных погрешностей случайных величин, получим погрешности второго ранга.

Чтобы оценить границы доверительного интервала $\pm E$ (надежностью $1/2$), можно расположить величины $\Delta u(x_i)$ в порядке неубывания. Тогда число, стоящее в середине ряда, является оценкой Δ_c , а числа, находящиеся в серединах левой и правой половин ряда — оценки соответственно левой и правой границ искомого интервала. Абсолютные значения их разностей с числом, стоящим в середине ряда, являются

оценками для вероятной погрешности величин ошибок $\Delta u(x)$. Этот прием можно использовать для быстрой приближенной оценки погрешностей второго ранга.

Для сравнения способов оценки погрешностей второго ранга, очевидно, нужно иметь оценки их погрешностей, т. е. нужно оценивать погрешности третьего ранга. Вообще при изучении каких-либо погрешностей требуется оценивать погрешности ранга на единицу выше. Данная работа касается главным образом погрешностей первого ранга. Поэтому мы ограничимся рассмотрением погрешностей первого и второго рангов и лишь отметим, что погрешности следующего ранга, на которые до сих пор не обращалось внимания, также должны со временем стать объектами исследований.

Находя значения Δ , $\sigma(\Delta \lg x)$ или $|\Delta \lg x|$ и E и вычисляя от них антилогарифмы, получаем соответственно оценки δ , δ_σ , $\delta_{|\Delta|}$ и δ_E . Находя же погрешности названных значений (погрешности второго ранга) и беря от них антилогарифмы, получаем множители для вычисления соответствующих таким погрешностям границ доверительных интервалов этих оценок. Указанные множители и приведены в табл. 2 и 3. В качестве доверительных интервалов для оценок погрешностей здесь использованы интервалы вида $\pm\sigma$ (табл. 2) и $\pm E$ (табл. 3), определявшиеся через дисперсии дисперсий по приближенным формулам (50—52).

В принципе несложно подсчитывать погрешности оценок погрешностей и более точно, с использованием известного аппарата оценок точности нахождения дисперсий случайных величин, подчиняющихся χ^2 -распределению (Вентцель, 1962). Однако обычно это не требуется. В частности, для приведенных в табл. 3 данных такой более точный (но и более громоздкий) подсчет дает следующие доверительные интервалы надежностью 0,5: (0,06; 0,09) для $D(\Delta_{1,2})$, (0,23; 0,39) для $D(\lg C_1)$ и (0,18; 0,3) для $D(\lg C_2)$, что несущественно отличается от интервалов, найденных с помощью приближенной формулы, несмотря на малое n . Однако при построении широких доверительных интервалов большой надежности (например, интервала $\pm 3\sigma$), когда существенно сказывается асимметрия χ^2 -распределения, приближенные формулы, выведенные в предположении приближенно нормального распределения для D , при ограниченном числе n становятся явно не применимыми.

Искажения, вносимые дискретностью записей и группированием

Выше в теоретических построениях мы предполагали, что результаты измерений — это точки на непрерывной числовой оси (непрерывной шкале). В действительности же все числовые записи дискретны, т. е. являются точками на дискретной шкале. Интервал между двумя соседними значениями шкалы, которые могут быть указаны при записях, назовем интервалом дискретности записей. При равномерной шкале записей интервал дискретности постоянен. Если, например, результаты измерений могут быть записаны в виде любых отдельных чисел с постоянным числом значащих цифр, то интервал дискретности равен единице последней значащей цифры.

Иногда при записях указываются границы интервалов предполагаемых значений измеряемых величин. Например, раньше при экспрессном спектральном анализе часто делались записи вида 0,01—0,03%; 0,03—0,1; 0,1—0,3% и т. д.

Теперь более распространены записи в виде отдельных чисел, представляющих определенный интервал. Например, при экспрессном спектральном анализе в ряде организаций применяются шкалы с кратностью

$3 \div 3,33$ или $1,2 \div 1,33$. Тогда записываются числа соответственно 1; 3; 10; 30; ... или 1; 1,2; 1,5; 2; 2,5; 3; 4; 5; 6; 8; 10; ... (обычно в тысячных, десятитысячных или некоторых других долях процента). Эти числа представляют интервалы, границы между которыми являются средними геометрическими из соответствующих чисел-представителей. Например, в случае первой из указанных шкал все оценки концентраций от $\sqrt{1 \cdot 3}$ до $\sqrt{3 \cdot 10}$ записываются числом 3. Сохранение примерно постоянной кратности шкалы (с округлением получаемых чисел) и указанное определение границ интервалов означает примерно равномерную (линейную) шкалу для логарифмов концентраций, где границы интервалов лежат посередине между числами-представителями. Это согласуется с обсуждавшейся выше примерно одинаковой различимостью концентраций, логарифмы которых отличаются на одинаковую величину.

В данном разделе исследуется влияние дискретности записей на точность результатов измерений. Вполне очевидно, что аналогичное влияние оказывает группирование исходных данных, производимое часто для облегчения статистической обработки любого числового материала. Каждый интервал будем обозначать одним числом. Ширину интервала дискретности обозначим λ .

В широких кругах специалистов, особенно в лабораториях, применяющих экспрессные методы вещественного анализа, распространена оценка качества измерений по воспроизводимости их результатов: измерения считаются хорошими, если совпадают записи результатов при первичных и повторных измерениях. Этим обуславливается и выбор интервала дискретности на основании интуитивного количественно-неопределенного требования, чтобы интервал был «обеспечен» точностью измерений.

Соответственно законам распределения ошибок существующих методов измерений, отлична от нуля вероятность получения значения x из любой части промежутка (ξ_m, ξ_s) , охватывающего весь диапазон возможных значений (от 0 до 100%). Это означает, что при любых интервалах дискретности записей возможно попадание результатов первого и повторного измерений в разные интервалы дискретности (за исключением не представляющего интереса случая, когда интервал дискретности равен (ξ_m, ξ_s)). Поэтому полной обеспеченности интервала дискретности точностью измерений не может быть. В то же время стремление к такой «обеспеченности» породило тенденцию к завышению величины интервала дискретности записей результатов экспрессных методов измерений, считающихся «неточными». Это привело в геологии и геохимии к весьма нежелательным последствиям, отмечавшимся в литературе (Соловов, 1965).

Запись результатов измерений с большой дискретностью приводит к неприменимости важных положений математической статистики, разработанных для недискретных данных. В частности, из-за совпадения многих результатов кратных измерений точность среднего $u(x)$ не растет существенно с увеличением кратности: среднее из совпадающих результатов при любом их числе одинаково, и отличие $u(x)$ от $u(\xi)$ не изменяется. Тогда несправедлива формула $D(\Delta u(x)) = \frac{1}{m} D(\Delta u(x))$. Из сказанного следует, что при записях результатов измерений с высокой «обеспеченностью» их точностью измерений и при отражении этой «обеспеченности» числом значащих цифр не имело смысла вычисление среднего из результатов измерений с большим числом значащих цифр. Вероятно, отсутствием учета этих положений объясняется настойчиво повторяющееся рядом исследователей, со ссылками на крупные авторитеты (в том числе на Д. И. Менделеева), утверждение о невозможности получения сравнительно точных результатов из менее точных путем

увеличения числа измерений (Великанов, 1962; Бабко, Пятницкий, 1968; и др.) *.

В последние годы стало появляться более разумное требование выбирать такой интервал дискретности, который «обеспечивается» точностью измерений лишь с некоторой надежностью $\Lambda < 1$. Это требование сформулировано следующим образом: «Числовое значение результата измерения должно оканчиваться цифрой того же разряда, что и значение погрешности» (Маликов, Тюрин, 1966) **. В работе (Мешалкин, 1964) показано, что искажения среднего арифметического, связанные с дискретностью записей, не превышают 0,04 от этого среднего, если ширина интервала дискретности не больше величины средней квадратической погрешности (при нормальном распределении ошибок). В предположении такого ограничения интервала дискретности даются рекомендации по оценкам точности экспрессного спектрального анализа в работе (Лончих, Мешалкин, 1964).

В то же время не может быть одного оптимального для всех случаев интервала дискретности записей, при котором всегда можно считать отсутствующими связанные с этим искажения. Несомненно, что в зависимости от требуемой точности результатов и стоимости различных операций ширина интервала дискретности может быть различной как в абсолютном отношении, так и по отношению к погрешности измерений. Поэтому представляет интерес выяснение зависимости между вносимым искажением результатов и шириной интервала дискретности во всем диапазоне ее возможных значений.

При некоторых ограничивающих условиях можно устранить связанное с дискретностью записей смещение оценок статистических параметров распределения измеряемых величин введением специальных поправок. Таковыми являются поправки Шешпарда, среди которых наиболее известна поправка к дисперсии измеряемой величины: из значения D , полученного при вычислениях, вычитается $\lambda^2/12$. Однако поправки Шешпарда найдены для $\lambda/\sigma \rightarrow 0$ и при существенной дискретности записей, при $\lambda/\sigma \gg 0$, могут не только не улучшать, но даже ухудшать получаемые оценки (Кендалл, Стьюарт, 1966).

Целью данного раздела, в продолжение упомянутых работ, является описание функциональных соответствий между дискретностью записей (величиной λ) и смещениями оценок $\overline{u(x)} | \xi$ и $D(\Delta u(x))$ — соответствий, которые позволяют вводить нужные поправки. При этом под u понимается нормализующая функция.

Для упрощения записей расчетных формул обозначение нормализующей функции опускается, т. е. предполагается, что значения Δx распределены нормально. При этом x означает тот произвольный результат измерения, который был бы получен при недискретной записи, а x_d — его дискретная запись. Величина x_d , относящаяся к определенному (i -му) интервалу, будет обозначаться x_i . Поскольку погрешность измерений постоянна во всем диапазоне измерений (в связи со сказанным относительно функции u), то шкалу для x_d целесообразно принять равномерной, т. е. $\lambda = x_{i+1} - x_i = \text{const}(i)$, а значения $\{x_i\}$ относить к серединам соответствующих интервалов.

В случае теоретического определения любого среднего будем полагать m как угодно большим и писать среднее арифметическое вместо математического ожидания (\bar{x} вместо $M(x)$ и т. п.). Систематическую ошибку будем считать исключенной.

* Некоторые исследователи считают, что повышение кратности измерений позволяет лишь уменьшить риск грубых ошибок, так как, сопоставляя результаты, можно выбрать наиболее близкие как наиболее достоверные (Wagner, 1967).

** В упомянутой работе предполагается, что выполняется равенство $D(\overline{\Delta x}) = \frac{1}{m} D(\Delta x)$.

Через $\sigma = \sigma(\Delta x)$ обозначим среднеквадратическую ошибку величин x , которая наблюдалась бы при недискретной записи результатов измерений, $\sigma_d = \sigma(\Delta x_d)$ — среднеквадратическую ошибку величин x_d , которая фактически имеется в дискретно записанных результатах измерений и включает искажения, связанные с такой записью. Обозначение σ_d^* будет применяться для той оценки фактической среднеквадратической погрешности (величины σ_d), которая получается непосредственно при вычислениях по формулам, выведенным для недискретных записей. Таким образом, при вычислениях по приводившимся выше формулам, подставляя в них дискретно записанные величины x_i , мы получаем «непосредственную» оценку σ_d^* , смещенную относительно фактической погрешности этих величин, так как формулы выведены без учета искажений, вносимых дискретностью. С помощью специальных операций мы можем по найденной смещенной оценке вычислить несмещенную оценку фактической погрешности σ_d . Она будет характеризовать действительную точность результатов при используемой дискретности, т. е. при заданном значении λ . Величина же σ показывает, до какого значения в пределе может быть снижена среднеквадратическая ошибка при используемой методике измерений, если уменьшать величину λ .

Аналогичный смысл имеют обозначения оценок средних абсолютных погрешностей: соответственно $|\overline{\Delta}|$, $|\overline{\Delta}_d|$, $|\overline{\Delta}_d^*|$.

Величину λ/σ назовем относительной дискретностью, а σ/λ — обратной относительной дискретностью.

Многократные измерения одной величины. При многократных измерениях одной величины ξ формула для плотности вероятности недискретно записываемых результатов имела бы, при оговоренных условиях, вид:

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (53)$$

Фактически же при дискретной записи все значения x , удовлетворяющие неравенствам $x_i - \frac{\lambda}{2} < x < x_i + \frac{\lambda}{2}$, т. е. попадающие в i -й интервал, записываются в результатах как x_i (граничные значения указанного интервала относятся с равной вероятностью как к нему, так и к соседним интервалам). Следовательно, вероятность появления значения x_i в результатах измерений равна

$$P(x_i) = \int_{x_i - \lambda/2}^{x_i + \lambda/2} p(x) \cdot dx. \quad (54)$$

Примем $i=0$ для ближайшего к ξ дискретного значения величины x ; остальные дискретные значения, находящиеся на числовой оси по ту же сторону от ξ , обозначим (по порядку удаления) x_1, x_2, x_3, \dots , а значения, лежащие по другую сторону от ξ , обозначим (также по порядку удаления) $x_{-1}, x_{-2}, x_{-3}, \dots$ (рис. 7).

Вполне очевидно, что

$$x_i - \xi = (i+q) \cdot \lambda, \quad (55)$$

где q — доля интервала λ , отделяющая x_0 от ξ , причем $0 \leq q \leq 1/2$.

Подставляя выражения (55) и (53) в (54), получим после несложных преобразований:

$$P(x_i) = \frac{1}{2} \left[\Phi\left(\left(i+q+\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) - \Phi\left(\left(i+q-\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) \right], \quad (56)$$

где Φ — символ интеграла вероятностей, определяемого как

$$\Phi(\xi) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int_0^{\xi} e^{-\frac{z^2}{2}} \cdot dz. \quad (57)$$

Среднее арифметическое дискретных значений x_i , получаемых при многократных измерениях одной величины ξ , определяется вероятностями этих значений:

$$\bar{x}_d = \sum_{i=-\infty}^{\infty} x_i \cdot P(x_i) = \sum_{j=0}^{\infty} [x_j \cdot P(x_j) + x_{-j-1} \cdot P(x_{-j-1})]. \quad (58)$$

Будем считать, что \bar{x}_d вычисляется с таким числом значащих цифр, что дополнительным искажающим влиянием дискретности его записи заведомо можно пренебречь.

Обозначим: $\Delta_{см} = \Delta_{см}(\bar{x}_d) = \bar{x}_d - \xi$ — смещение \bar{x}_d от ξ . Выразим его в долях λ , используя выражения (58), (56) и (55):

$$\begin{aligned} \frac{\Delta_{см}(\bar{x}_d)}{\lambda} = \frac{\bar{x}_d - \xi}{\lambda} = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \left\{ (j+q) \cdot \left[\Phi\left(\left(j+q+\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) - \right. \right. \\ \left. \left. - \Phi\left(\left(j+q-\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) \right] - (j-q+1) \cdot \left[\Phi\left(\left(j-q+\frac{3}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) - \right. \right. \\ \left. \left. - \Phi\left(\left(j-q+\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) \right] \right\}. \quad (59) \end{aligned}$$

Как видим, величина смещения зависит от определяемого величины q положения ξ в интервале дискретности и от относительной дискретности. Эта зависимость наглядно видна на рис. 8. (Вместо относительной дискретности здесь и далее на рисунках используется обратная относительная дискретность σ/λ , что оказалось более удобным для построений и использования.)

$\Delta_{см} = 0$ при $q = 0 \vee q = 1/2$ для всех λ/σ , так как при этих значениях q значения x_i распределяются симметрично относительно ξ .

При $\left(\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow \infty\right) \wedge (0 \leq q \leq 1/2)$ в ряду выражения (59) равны нулю все члены с $j \geq 1$, член же с $j = 0$ равен $q \cdot [\Phi(\infty) - \Phi(-\infty)] = 2q$ (здесь учтено, что при $j = 0$ и $q < 1/2$ сумма $j + q - 1/2$ в аргументе второго интеграла вероятностей является отрицательным числом). Поэтому, согласно (59), при заданном условии $\Delta_{см}/\lambda = q$, или

$$\lim_{\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow \infty} \frac{\Delta_{см}(\bar{x}_d)}{\lambda} = q, \quad \lim_{\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow \infty} \Delta_{см}(\bar{x}_d) = \lambda q, \quad (60)$$

причем приближение $\Delta_{см}$ к пределу происходит снизу. Наглядно это можно представить с помощью рис. 7: с уменьшением σ по сравнению с λ область, ограничиваемая кривой $p(x)$, сужается и практически всем значениям x приписывается ближайшее дискретное значение x_0 .

Отсюда следует парадоксальный, на первый взгляд, вывод: если при единичных измерениях с некоторым фиксированным значением λ уменьшение σ всегда означает повышение точности получаемых результатов, то при кратности $m > 1$, когда окончательным результатом является \bar{x}_d , положение меняется. Согласно формулам (60), при $\lambda = \text{const}$ уменьшение σ , означающее рост величины λ/σ , приводит к увеличению смещения величины \bar{x}_d от ξ . Такое явление объясняется тем, что при малой величине σ (по сравнению с λ) практически всем результатам измерений приписывается только одно дискретное значение x_0 , отличающееся от ξ на величину $\lambda \cdot q$. При увеличении же σ начинают появляться в существенном количестве и другие дискретные значения: x_1, x_{-1}, \dots — в том соотношении, которое соответствует действительному поло-

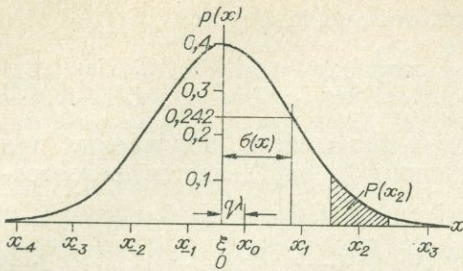


Рис. 7. К выводу формулы вероятности получения определенных дискретных значений результатов измерений.

q — доля интервала дискретности λ , на которую отличается ξ от ближайшего записываемого дискретного значения; $P(x_2)$ — вероятность дискретного значения x_2 , равная заштрихованной доле площади, ограничиваемой кривой $p(x)$ и осью ox .

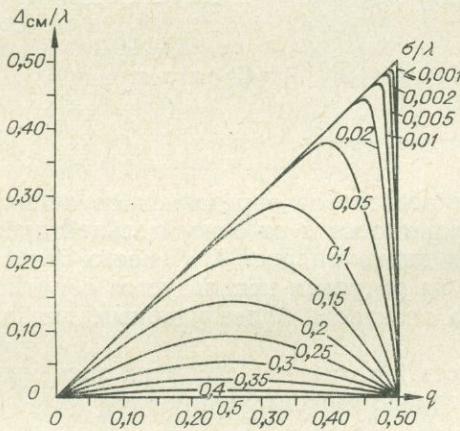


Рис. 8. Зависимость между смещением результатов измерений и положением измеряемой величины в интервале дискретности при различных значениях обратной относительной дискретности.

что и эти результаты. Поскольку $\bar{x}_{дл}$ занимает промежуточное положение между ξ и x_0 , то при указанной системе записи величина $\bar{x}_{дл}$ записывается как x_0 (ближайшее дискретное значение шкалы). Смещение этого знания относительно ξ :

$$\Delta_{см}(\bar{x}_{дл}) = x_0 - \xi = \lambda q. \quad (61)$$

Это равенство справедливо при всех λ/σ , выражение же $\Delta_{см}(\bar{x}_{дл}) = \lambda q$ было получено только для нереального случая $\lambda/\sigma \rightarrow \infty$ и имеющего нулевую вероятность случая $q=0$. В остальных случаях, как указывалось, $\Delta_{см}(\bar{x}_{дл}) < \lambda q$. Поэтому в среднем заведомо $\Delta_{см}(\bar{x}_{дл}) > \Delta_{см}(\bar{x}_{дл})$.

Таким образом, запись среднего из результатов измерений с той же дискретностью, с какой записаны эти результаты, приводит заведомо к увеличению искажения по сравнению с менее дискретной записью.

Значение ξ может находиться в любой части интервала дискретности. При этом среднее из возможных значений q равно $1/4$, так как q меняется от 0 до $1/2$. Поэтому, согласно (61), величина $\Delta_{см}(\bar{x}_{дл})$ меняется от 0 до $\lambda/2$, составляя в среднем $\lambda/4$. Соответственно равенству (61), увеличение точности значения $\bar{x}_{дл}$ с увеличением кратности измерений заведомо ограничено дискретностью записей. Таким образом, из-

жению ξ внутри интервала дискретности. Хотя ошибка единичного измерения при этом растет, при большом числе измерений оказывается возможным получить значение $\bar{x}_{дл}$, меньше отличающееся от ξ . Поэтому в случаях, когда величина λ неизменна, при фиксированном числе m , очевидно, должно быть некоторое оптимальное значение $\sigma = \sigma_{опт}$; при достаточно большом значении σ , когда случайные отклонения значений $x_{дл}$ от ξ в среднем велики ($\gg \lambda$), ошибка в оценке ξ по $\bar{x}_{дл}$ может быть также сколь угодно большой ($> \Delta_{см}$). Поскольку эта ошибка уменьшается с ростом m , то $\sigma_{опт}$ должно быть тем больше, чем больше m .

Согласно равенству (60), при больших значениях относительной дискретности смещение $x_{дл}$ от ξ может приближаться к $0,5\lambda$, если $q \rightarrow 1/2$ (но при строгом равенстве $q=1/2$, как указывалось, $\Delta_{см}(\bar{x}_{дл})=0$). Это означает, что при большой относительной дискретности погрешность измерений практически полностью определяется дискретностью записей (и именно тогда трудно повысить точность результатов за счет кратности измерений).

Обозначим через $\bar{x}_{дл}$ ту запись среднего из дискретных результатов измерений, которая делается с той же дискретностью,

вестное требование записи среднего с тем же числом значащих цифр, какое имеется в значениях x_d , т. е. в виде \bar{x}_d , является нерациональным.

Средняя абсолютная погрешность дискретно записываемых результатов может быть определена через вероятности их получения:

$$|\bar{\Delta}_d| = \sum_{i=-\infty}^{\infty} |x_i - \xi| \cdot P(x_i).$$

Преобразуем этот ряд с двумя бесконечными пределами в ряд с одним бесконечным пределом, подобно тому как это сделано в выражении (58). Тогда, используя равенства (55) и (56), получим:

$$\begin{aligned} \frac{|\bar{\Delta}_d|}{\lambda} = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \left\{ (j+q) \cdot \left[\Phi \left(\left(j+q + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma} \right) - \Phi \left(\left(j+q - \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma} \right) \right] + \right. \\ \left. + (j-q+1) \cdot \left[\Phi \left(\left(j-q + \frac{3}{2} \right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma} \right) - \Phi \left(\left(j-q + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (62)$$

Вполне очевидно, что $\lim_{\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow 0} |\bar{\Delta}_d| = |\bar{\Delta}|$. Для случая $\lambda/\sigma \rightarrow \infty$ получаем, согласно (62):

$$\lim_{\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow 0} |\bar{\Delta}_d| = \lambda q, \quad (63)$$

причем приближение к этому пределу происходит снизу. В общем же случае зависимость $|\bar{\Delta}_d|$ от λ/σ (или σ/λ) и q , выражаемая формулой (62), довольно сложна. Она показана графически на рис. 9*.

Если ξ неизвестно, то неизвестно и q . Тогда оценку средней абсолютной погрешности можно получить, сравнивая полученные результаты измерений с их средним значением. Эта оценка сходится по вероятности к величине

$$\begin{aligned} |\bar{\Delta}_d^*| = \sum_{i=-\infty}^{\infty} |x_i - \bar{x}_d| \cdot P(x_i) = \sum_{j=0}^{\infty} [|x_j - \bar{x}_d| \cdot P(x_j) + |x_{-j-1} - \\ - \bar{x}_d| \cdot P(x_{-j-1})] = \sum_{j=0}^{\infty} [(x_j - \bar{x}_d) \cdot P(x_j) + (\bar{x}_d - x_{-j-1}) \cdot P(x_{-j-1})]. \end{aligned} \quad (64)$$

Учитывая, что $\bar{x}_d = \xi + \Delta_{см}$, и используя равенства (55) и (56), получаем из выражения (64):

$$\begin{aligned} \frac{|\bar{\Delta}_d^*|}{\lambda} = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \left\{ \left(j+q - \frac{\Delta_{см}}{\lambda} \right) \cdot \left[\Phi \left(\left(j+q + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma} \right) - \Phi \left(\left(j+q - \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma} \right) \right] + \right. \\ \left. + \left(j-q+1 + \frac{\Delta_{см}}{\lambda} \right) \cdot \left[\Phi \left(\left(j-q + \frac{3}{2} \right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma} \right) - \Phi \left(\left(j-q + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (65)$$

где $\frac{\Delta_{см}}{\lambda}$ вычисляется по формуле (59).

При $\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow 0$ $|\bar{\Delta}_d^*| \rightarrow |\bar{\Delta}|$. Если же $\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow \infty$, то, учитывая (60), получаем из (65): $|\bar{\Delta}_d^*| \rightarrow \frac{\lambda}{2}$ в случае $q=1/2$, имеющем нулевую вероятность, и $|\bar{\Delta}_d^*| \rightarrow 0$ при всех остальных возможных значениях $q < 1/2$.

* На этом и последующих рисунках данного раздела наборы теоретических кривых ограничиваются теми областями значений параметров, в которых относительная дискретность существенно (в отношении изображения на рисунке при его масштабе) сказывается на получаемых результатах, а поправка является существенно непостоянной.

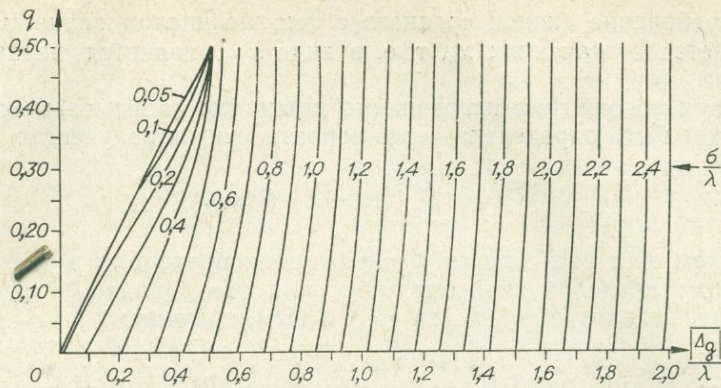


Рис. 9. Зависимость между средней абсолютной погрешностью (в долях λ), обратной относительной дискретностью и положением измеряемой величины в интервале дискретности.

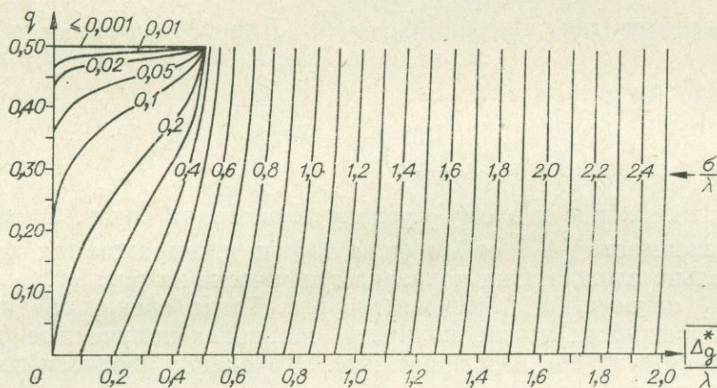


Рис. 10. Зависимость между непосредственной оценкой средней абсолютной погрешности (в долях λ), обратной относительной дискретностью и положением измеряемой величины в интервале дискретности.

Таким образом, с увеличением относительной дискретности записей обычная оценка средней абсолютной погрешности перестает отражать фактическую точность результатов.

Согласно (65), вычисляемая по результатам измерений оценка средней абсолютной погрешности зависит от относительной дискретности и положения ξ в интервале дискретности, т. е. от величины q . Эта зависимость показана на рис. 10.

Оценкой q , которую можно вычислить по значениям x_d , является величина

$$q^* = \frac{|x_0 - \bar{x}_d|}{\lambda} = \left| \frac{x_0 - \xi}{\lambda} - \frac{\bar{x}_d - \xi}{\lambda} \right| = \left| q - \frac{\Delta_{\text{см}}(\bar{x}_d)}{\lambda} \right|. \quad (66)$$

Вычисляя $|\Delta_d^*|/\lambda$ и q^* для определенных значений σ/λ и q , можно найти соответствие между $|\Delta_d^*|/\lambda$, σ/λ и q^* (рис. 11) или между $|\Delta_d^*|/\lambda$, q^* и q (рис. 12). Из рис. 11, используя вычисленные по исходным данным значения $|\Delta_d^*|/\lambda$ и q^* , можно найти величину σ/λ , а из рис. 12 — величину q . Оценка $|\Delta_d^*|$ для исходных данных находится по формулам, приведенным без учета дискретности в разделе о дисперсиях и случайных погрешностях, а оценка величины q^* определяется как выра-

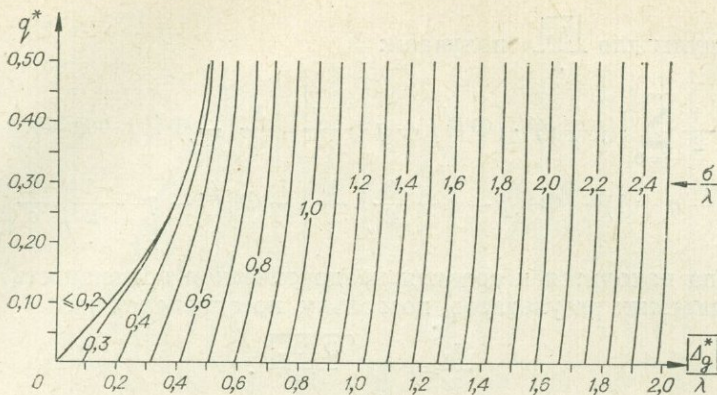


Рис. 11. Зависимость между непосредственной оценкой средней абсолютной погрешности (в долях λ), обратной относительной дискретностью и непосредственной оценкой положения измеряемой величины в интервале дискретности.

женное в долях λ абсолютное отклонение \bar{x}_d от ближайшего к нему значения шкалы (x_0).

Зная q , находим оценку ξ , не смещенную дискретностью записей (ξ располагается на расстоянии $q\lambda$ от x_0 , по ту же сторону, что и \bar{x}_d). По величинам q и σ/λ с помощью рис. 9 находится $|\Delta_d|$ — оценка погрешности, не смещенная дискретностью записей.

Как видно на рис. 12, с уменьшением $\frac{|\Delta_d^*|}{\lambda}$ точность определения q (а следовательно, и ξ) по результатам измерений снижается для всех $q \neq 1/2$ из-за слияния кривых с разными q в одну кривую (левее этой кривой находится область невозможных сочетаний q^* и $\frac{|\Delta_d^*(x_d)|}{\lambda}$). Лишь

в случае $q=1/2$, имеющем нулевую вероятность, не возникает такая неопределенность (поэтому график для $q=1/2$ является горизонтальной прямой во всей области возможных значений q^* и $\frac{|\Delta_d^*|}{\lambda}$).

Это объясняется уже рассмотренным выше явлением: уменьшение $\frac{|\Delta_d^*|}{\lambda}$ означает увеличение относительной дискретности, когда все большее число значений x_d принимает одно и то же значение x_0 и \bar{x}_d все более приближается к x_0 , удаляясь от ξ , с потерей информации о действительном положении ξ .

Дисперсия результатов измерений одной величины ξ при дискретной записи равна, по определению:

$$D(x_d) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} (x_i - \xi)^2 \cdot P(x_i).$$

Применяя преобразования, аналогичные использованным выше при вы-

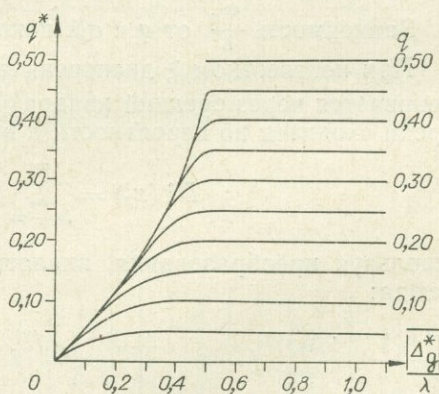


Рис. 12. Зависимость между непосредственной оценкой средней абсолютной погрешности (в долях λ), непосредственной оценкой положения измеряемой величины в интервале дискретности и действительным ее положением.

воде формулы для $\frac{|\overline{\Delta_d}|}{\lambda}$ получаем:

$$\frac{D(x_d)}{\lambda^2} = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \left\{ (j+q)^2 \cdot \left[\Phi\left(\left(j+q+\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) - \Phi\left(\left(j+q-\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) \right] + \right. \\ \left. + (j-q+1)^2 \cdot \left[\Phi\left(\left(j-q+\frac{3}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) - \Phi\left(\left(j-q+\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) \right] \right\}.$$

Отсюда находится и средняя квадратическая погрешность дискретно записываемых результатов, поскольку, по определению:

$$\frac{\sigma_d}{\lambda} = \sqrt{\frac{D(x_d)}{\lambda^2}}.$$

Вполне очевидно, что для любых q при $\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow 0$, т. е. с уменьшением относительной дискретности, $D(x_d) \rightarrow D(x)$, $\sigma(x_d) \rightarrow \sigma(x)$ для любых q . При $\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow \infty$ (с увеличением относительной дискретности) $D(x_d) \rightarrow \lambda^2 q^2$, причем приближение к указанному пределу происходит слева.

Учитывая это, а также принимая во внимание равенство (63), получаем:

$$\lim_{\frac{\sigma}{\lambda} \rightarrow \infty} \frac{|\overline{\Delta_d}|}{\lambda} = \lim_{\frac{\sigma}{\lambda} \rightarrow \infty} \sigma_d = \lambda q.$$

Таким образом, отношение $\frac{|\overline{\Delta_d}|}{\sigma_d}$, равное при пренебрежимо малой дискретности величине $\sqrt{\frac{2}{\pi}} \approx 0,8$, при увеличении дискретности возрастает до 1, т. е. различие между значениями погрешностей $|\overline{\Delta_d}|$ и σ_d уменьшается.

Зависимость $\frac{\sigma_d}{\lambda}$ от q и σ/λ показана на рис. 13.

При неизвестном ξ дисперсия результатов многократных измерений оценивается через средний квадрат отклонения от $\overline{x_d}$. Такая оценка дисперсии сходится по вероятности к величине

$$D^*(x_d) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} (x_i - \overline{x_d})^2 \cdot P(x_i).$$

Используя преобразования, аналогичные приведенным выше, получаем отсюда:

$$\frac{D^*(x_d)}{\lambda^2} = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \left\{ \left(j+q - \frac{\Delta_{cm}}{\lambda}\right)^2 \cdot \left[\Phi\left(\left(j+q+\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) - \Phi\left(\left(j+q-\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) \right] + \right. \\ \left. + \left(j-q+1 + \frac{\Delta_{cm}}{\lambda}\right)^2 \cdot \left[\Phi\left(\left(j-q+\frac{3}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) - \Phi\left(\left(j-q+\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{\lambda}{\sigma}\right) \right] \right\}. \quad (67)$$

Соответствующая оценка средней квадратической погрешности определяется равенством

$$\frac{\sigma_d^*}{\lambda} = \sqrt{\frac{D^*(x_d)}{\lambda^2}}. \quad (68)$$

При $\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow 0$ $D^*(x_d) \rightarrow D(x)$, $\sigma_d^* \rightarrow \sigma$. С другой стороны, в связи с равенством (60) из выражений (67) и (68) следует: в случае $q=1/2$

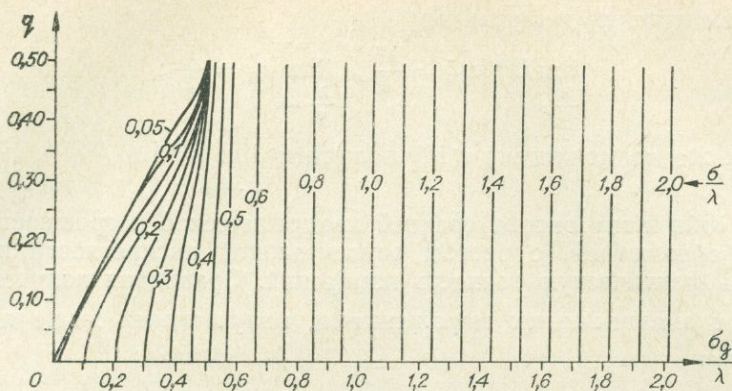


Рис. 13. Зависимость между средней квадратической погрешностью (в долях λ), обратной относительной дискретностью и положением измеряемой величины в интервале дискретности.

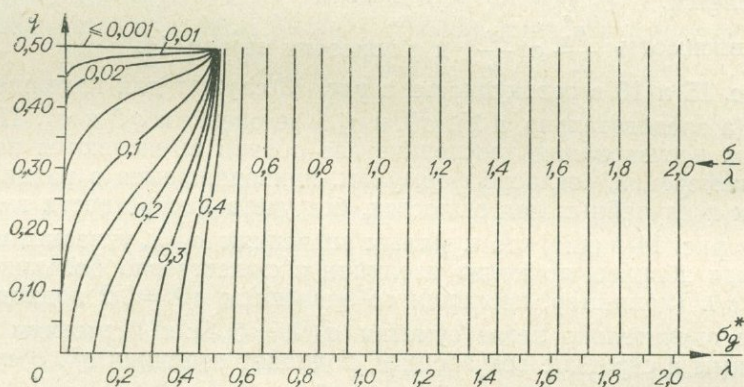


Рис. 14. Зависимость между непосредственной оценкой средней квадратической погрешности (в долях λ), обратной относительной дискретностью и положением измеряемой величины в интервале дискретности.

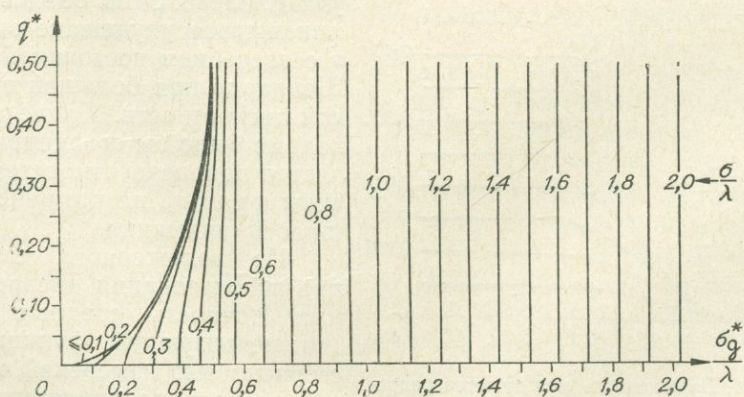


Рис. 15. Зависимость между непосредственной оценкой средней квадратической погрешности (в долях λ), обратной относительной дискретностью и непосредственной оценкой положения измеряемой величины в интервале дискретности.

(имеющем нулевую вероятность)

$$\lim_{\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow \infty} D^*(x_d) = \frac{\lambda^2}{4}, \quad \lim_{\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow \infty} \sigma_d^* = \frac{\lambda}{2};$$

при всех же возможных $q < 1/2$ получаем $\lim_{\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow \infty} D^*(x_d) = 0$ и $\lim_{\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow \infty} \sigma_d^* = 0$.

То есть «обычная» оценка средней квадратической погрешности, как и средней абсолютной, с ростом относительной дискретности перестает отражать фактическую точность измерений. Сравнивая полученные равенства с аналогичными выражениями, полученными выше для $|\Delta_d^*|$, получаем:

$$\lim_{\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow \infty} \frac{|\Delta_d^*|}{\sigma_d^*} = 1,$$

т. е. различие между оценками средней абсолютной и средней квадратической погрешностей при увеличении относительной дискретности уменьшается.

Зависимость $\frac{\sigma_d^*}{\lambda}$ от $\frac{\sigma}{\lambda}$ и q показана на рис. 14.

Рис. 15 и 16 в совокупности с рис. 13 служат для нахождения оценок q , (а следовательно, и ξ), σ/λ и σ_d/λ по оценкам q^* и σ_d^* . При практических исследованиях последние две оценки вычисляются по результатам измерений, согласно формулам, приводившимся в разделе о дисперсиях и случайных погрешностях, без учета дискретности записей.

Из рис. 14 видно, что к малым значениям σ_d^*/λ , указанным в левой части оси абсцисс, подходят изолинии с существенно большими значениями σ/λ (например, изолиния со значением $\sigma/\lambda = 0,2$ подходит к оси абсцисс значительно левее отметки $\sigma_d^*/\lambda = 0,2$); к значениям же σ_d^*/λ , указанным в середине оси абсцисс, подходят изолинии σ/λ с существенно меньшими значениями. С дальнейшим увеличением σ_d^*/λ , т. е. с уменьшением относительной дискретности, эта разница, сохраняясь по знаку, несколько уменьшается, становясь устойчивой и соответствующей поправке Шеппарда для оценки $D_d^*/\lambda^2 = (\sigma_d^*/\lambda)^2$. Таким образом, в действительности поправка переменна по величине и знаку, что ранее не учитывалось. Этим объясняется упоминавшееся ухудшение оценок D и σ с введением постоянной поправки Шеппарда при большой относительной дискретности. Кроме того, необходимо было бы оговаривать, вычисляется поправка относительно величины σ или σ_d , на что ранее не обращалось внимания.

Из изложенного следует, что при использовании дискретных данных точность среднего значения (симметризирующей функции) растет с кратностью измерений, но медленнее, чем это предполагается формулой $D(\overline{\Delta x_d}) = \frac{1}{m} D(\Delta x_d)$. В действительности

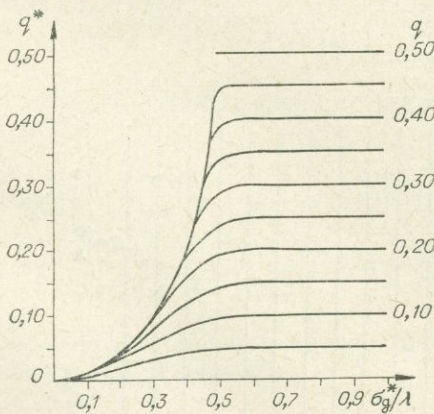


Рис. 16. Зависимость между непосредственной оценкой средней квадратической погрешности (в долях λ), непосредственной оценкой положения измеряемой величины в интервале дискретности и действительным ее положением.

$$D(\overline{\Delta x_d}) = \frac{1}{\bar{f}(q, \lambda/\sigma)} \cdot D(\Delta x_d), \text{ где } 1 \leq f(q, \lambda/\sigma) \leq m,$$

причем отличие $f(q, \lambda/\sigma)$ от m растет с увеличением относительной дискретности и q . Действительно, с увеличением λ/σ и q уменьшается $\frac{\sigma_d^*}{\lambda}$ и увеличивается q^* . Тогда (см. рис. 16) точка $(q^*, \sigma_d^*/\lambda)$ попадает в области слияния изолинии с различными q , где малая ошибка в положении точки приводит к большой ошибке в оценке q , а следовательно, и в оценке ξ .

Рассмотрим практическое использование приведенных теоретических кривых.

Пример. В спектральной лаборатории, проводящей экспрессный спектральный анализ, были произведены многочисленные независимые определения концентрации олова в одной пробе. Анализ проводился с записью результатов по $\sqrt{10} \approx 3,2$ -кратной шкале (в тысячных долях процента: 1; 3,2; 10; 32 и т. д.). Поскольку ошибки такого анализа распределены логарифмически-нормально, то вычислялась средняя квадратическая ошибка полученных значений логарифмов концентраций. При этом применялась формула, не учитывающая дискретности результатов. При используемых в данном разделе обозначениях эта формула имеет вид:

$$\sigma_d^* = \sqrt{\frac{1}{m-1} \cdot \sum_{i=1}^m (\lg C_i - \overline{\lg C})^2}. \quad (69)$$

Логарифм значения кратности шкалы концентраций дает величину интервала дискретности линейной шкалы логарифмов концентраций $\lambda = 0,5$. По результатам измерений найдено: $\overline{x_d} = \overline{\lg C} = 0,935$. Ближайшее дискретное значение $x_0 = 1$. Тогда $q^* = \frac{10,935 - 1}{0,5} = 0,13$. Антилогарифм величины $\overline{\lg C}$ дает (в тысячных долях %) значение концентрации $C = 8,62$. Подсчитанная по формуле (69) оценка величины σ_d^* оказалась равной 0,179. Антилогарифм этого числа равен 1,51, что соответствует относительной погрешности 51%.

По величине $\sigma_d^*/\lambda = 0,179/0,5 = 0,348$ и указанному выше значению q^* находим с помощью рис. 16: $q = 0,2$, т. е. $q\lambda = 0,1$. Откладывая эту величину на числовой оси от значения x_0 в сторону x_d , находим несмещенную дискретностью записей оценку величины $\xi: \bar{x} = 1 - 0,1 = 0,9$. Ее антилогарифм дает (в тысячных долях %) несмещенное значение наиболее вероятной концентрации 7,95.

С помощью рис. 15 по указанным q^* и σ_d^*/λ находим $\sigma/\lambda = 0,27$, откуда $\sigma = 0,27 \cdot 0,5 = 0,135$; $\text{ant}(\sigma) = 1,365$, что соответствует относительной погрешности 36,5%. По найденным σ/λ и q , пользуясь рис. 13, получаем величину $\sigma_d/\lambda = 0,36$, откуда $\sigma(x_d) = 0,36 \cdot 0,5 = 0,18$. Таким образом, значение σ_d^* оказалось в данном случае практически не смещенным относительно фактической погрешности σ_d ; наблюдаемое различие этих величин можно объяснить неточностью использованных графических построений. Отличие же σ_d^* и σ_d от найденной величины $\sigma(x)$ заслуживает внимания: оно свидетельствует о том, что при снижении дискретности записей относительные ошибки $\delta_{\sigma\%}$ можно существенно снизить (с 51% до 36,5%). Практически различие между найденными параметрами бывает значительно больше, чем в приведенном примере.

Двукратные измерения разных величин. При геохимических исследованиях распространены однократные измерения величин ξ и оценивание погрешностей повторным измерением части этих величин. При та-

ких условиях введение в значения x_d поправки на дискретность записей, разумеется, невозможно: при однократных измерениях остается равновероятным положение \bar{x}_d и ξ по любую сторону относительно x_0 . Для погрешностей же могут быть найдены несмещенные оценки по совокупности результатов двукратных измерений различных ξ из контрольной выборки. Рассмотрим получение таких оценок.

Ограничимся случаями, когда величины ξ принадлежат к широкому (по сравнению с λ) диапазону возможных значений и можно считать, что измеряемые значения попадают равновероятно в любую часть интервала между двумя смежными записываемыми (дискретными) значениями. Тогда значения q распределены равномерно в промежутке $[0; 1/2]$. Вычисляя для этих значений при разных λ/σ (или σ/λ) теоретические величины $|\overline{\Delta_d^*}|/\lambda$, σ_d^*/λ , $\Delta_{см}$, $|\overline{\Delta_d}|/\lambda$ и σ_d/λ , можно найти средние для всех q (математические ожидания): $|\overline{\Delta_d^*}|_{ср}/\lambda$, $\sigma_{д.ср}^*/\lambda$, $\Delta_{см.ср}/\lambda$, $|\overline{\Delta_d}|_{ср}/\lambda$ и $\sigma_{д.ср}/\lambda$. Зависимости между ними показаны на рис. 17—19.

Если $\frac{\lambda}{\sigma} \rightarrow \infty$ ($\sigma/\lambda \rightarrow 0$), то $|\overline{\Delta_d^*}|_{ср} \rightarrow 0,25\lambda$, $\sigma_{д.ср} \rightarrow 0,289\lambda$, $\frac{|\overline{\Delta_d}|_{ср}}{\sigma_{д.ср}} \rightarrow$

$\rightarrow 0,865$, т. е. и в данном случае нарушается соотношение между погрешностями, характерное для нормального распределения ошибок при недискретной записи результатов.

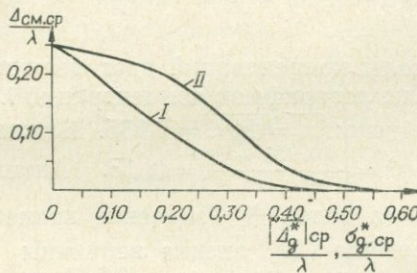


Рис. 17. Соотношения между средним смещением результата измерений и оценками погрешностей, вычисленными без учета дискретности записей.

I — зависимость $\Delta_{см.ср}/\lambda$ от $|\overline{\Delta_d^*}|_{ср}/\lambda$; II — зависимость $\Delta_{см.ср}/\lambda$ от $\sigma_{д.ср}^*/\lambda$.

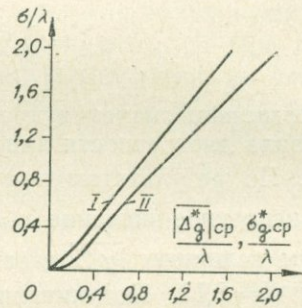


Рис. 18. Соотношения между среднеквадратической погрешностью результатов измерений, которая была бы получена при недискретных записях, и оценками действительных погрешностей, вычисленными без учета дискретности записей.

I — зависимость между σ/λ и $|\overline{\Delta_d^*}|_{ср}/\lambda$; II — зависимость между σ/λ и $\sigma_{д.ср}^*/\lambda$.

Пример. Одна из лабораторий выдавала результаты спектрального анализа в 3÷3,3-кратной градации (в тысячных долях %: 1; 3; 10; 30 и т. д.), т. е., как и в предыдущем примере, в среднем приблизительно можно принять кратность шкалы концентраций равной 3,2, а $\lambda=0,5$. Погрешность измерений определялась по результатам двукратного анализа серии различных проб:

$$|\overline{\Delta_d^*}|_{ср} = \frac{1}{\sqrt{2}n} \cdot \sum_{i=1}^n |\lg C_{1i} - \lg C_{2i}|. \quad (70)$$

Для меди было найдено: $|\overline{\Delta_d^*}|_{ср} = 0,0501$. Антилогарифм этого значения дает $\delta_{ср}^* = 1,12$, т. е. $\delta'_{ср\%} = 12\%$; $\frac{|\overline{\Delta_d^*}|_{ср}}{\lambda} = \frac{0,0501}{0,5} \approx 0,1$. Это

соответствует значению $\frac{|\overline{\Delta_d}|_{ср}}{\lambda} \approx 0,26$

(см. рис. 19), т. е. в действительности средняя абсолютная погрешность определения логарифмов концентраций равна $|\overline{\Delta_d}|_{ср} \approx 0,26 \cdot 0,5 = 0,13$ и $\delta_{ср} = 1,35$, $\delta_{ср} \% = 35\%$. По рис. 18 находим соответствующее

полученной величине $\frac{|\overline{\Delta_d^*}|_{ср}}{\lambda}$ значение $\frac{\sigma}{\lambda} = 0,08$, т. е. $\sigma = 0,04$; $|\overline{\Delta}| = 0,8$ $\sigma = 0,032$, $\sigma_{|\Delta|} = 1,08$, $\sigma'_{|\Delta|} \% = 8\%$.

Как видим, в данном случае существенно различаются все три оценки точности: вычисленная, фактическая и та, которая могла бы быть получена при недискретной записи. При этом средняя относительная погрешность измерения концентраций в принципе может быть снижена с 35% до 8% за счет одного лишь уменьшения относительной дискретности записей (составляющей здесь $\lambda/\sigma = 0,5:0,04 = 12,5$). Улучшение же методики, снижающее σ , при выбранном интервале дискретности не может быть эффективным для повышения точности результатов, поскольку, как указывалось выше, при $\sigma \rightarrow 0$ величина $|\overline{\Delta_d}|_{ср}/\lambda$ не может стать меньше 0,25; здесь же она лишь немногим выше (0,26). Таким образом, здесь явно целесообразно уменьшение λ .

При измерении концентрации в пробе визуальным сопоставлением ее спектра со спектрами эталонов, как делалось в описанном случае, для уменьшения дискретности результатов может понадобиться уменьшение интервала дискретности для эталонов. Поскольку спектры полного комплекса эталонов при экспрессном анализе фотографируются относительно редко, это, как показал опыт, несущественно влияет на производительность и стоимость работ.

Оптимальная дискретность. Выше уже говорилось, что в зависимости от условий оптимальной может быть различная дискретность. Но есть одно благоприятное значение дискретности, которое легко достижимо во многих случаях, — это значение λ , примерно равное (с возможным округлением) величине $E_{отс}$ — вероятной ошибке отсчета (по шкале прибора и т. п.). Действительно, весьма просто установить такое значение λ , когда исследователь предполагает равную вероятность попадания величины x в выбираемый интервал или в соседние с ним. Поскольку вероятная ошибка составляет только 0,675 от среднеквадратической, а ошибка отсчета заведомо меньше общей ошибки измерений, то такая система обеспечивает относительную дискретность $\lambda/\sigma < 1$. Согласно же приведенным рисункам, при всех таких значениях λ/σ смещение оценок, связанное с дискретностью записей, пренебрежимо мало для многих практических целей.

Из изложенного в данном разделе следует, что распространенный способ указания точности величин числом значащих цифр в действительности рационален только в ограниченном числе случаев. Для этого необходимо, чтобы распределение ошибок записываемых величин было симметричным и погрешности практически не менялись в диапазоне возможных значений записываемых величин, так как только тогда возможно использование линейной (равномерной) шкалы, отображающей

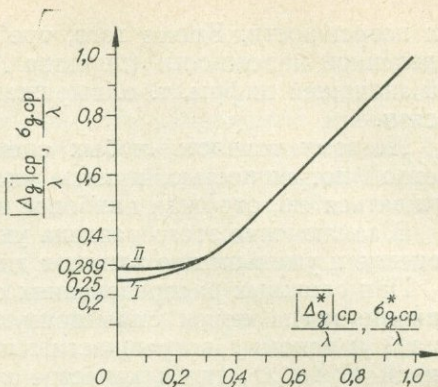


Рис. 19. Соотношения между действительными погрешностями результатов измерений и оценками этих погрешностей, вычисленными без учета дискретности записей.

I — зависимость между $|\overline{\Delta_d}|_{ср}/\lambda$ и $|\overline{\Delta_d^*}|_{ср}/\lambda$;

II — зависимость между $\sigma_{д.ср}/\lambda$ и $\sigma_{д.ср}^*/\lambda$.

эти погрешности. Кроме того, требуется, чтобы ширина интервала определенной надежности (порядка $\Lambda=0,5$) была равна единице последней значащей цифры, т. е. выражалась числом, кратным целой степени десяти.

Поэтому точность любых оценок лучше и проще указывать конкретной погрешностью, причем число значащих цифр может не ограничиваться ею, отражая наиболее вероятное значение.

В заключение этого раздела укажем на возможность иного подхода к оценке и уменьшению влияния дискретности записей.

При сложных распределениях ошибок измерений и группированных величин, когда поиск симметризирующей функции затруднителен, величина ξ и искомые погрешности могут быть найдены по накопительной кривой $P(X \leq x)$, где в качестве x следует брать границы интервалов дискретности (а не $\{x_i\}$); функциональное выражение такой кривой (с помощью аппроксимации) и нахождение ее параметров уже рассматривалось в предыдущей главе. При отсутствии систематических ошибок ξ оценивается как квантиль 1/2 этой кривой, а вероятная погрешность — по границам интервала с $\Lambda=1/2$, т. е. по квантилям 1/4 и 3/4.

Далее относительная дискретность предполагается настолько малой, что отличием x_d от x можно пренебречь (как это делалось и в предыдущих разделах), и поэтому вместо x_d пишется x .

Порог чувствительности

При измерениях многих величин существуют области относительного снижения точности метода. В частности, при спектральном анализе с фоторегистацией такие области соответствуют низким и высоким концентрациям, согласно известной форме так называемой характеристической кривой фотоэмульсии (Прокофьев, 1951). В случае высоких измеряемых концентраций возникающие затруднения устраняются сравнительно легко разбавлением проб. При низких же концентрациях требуется либо химическое обогащение проб, либо переход на другой, более чувствительный, метод вещественного анализа, что не всегда возможно.

В таких случаях можно воспользоваться тем, что в связи с влиянием случайных факторов даже низкая концентрация в пробе при вещественном анализе может проявить себя, с определенной вероятностью, подобно высокой концентрации. Проведя большое число измерений и построив для их результатов накопительную кривую, отражающую такую вероятность, можно по ее квантили 1/2 оценить действительную концентрацию, как указывалось выше, даже в случаях, когда она считается ниже порога чувствительности. Возможность построения такой функции видна по результатам экспериментов (Дубов, Квятковский, 1959), хотя до сих пор это не использовалось.

Пусть ξ_n — порог чувствительности выбранного метода вещественного анализа, т. е. такая величина, что при $x > \xi_n$ оценка x по результату однократного измерения считается достаточно надежной, а при $x < \xi_n$ — ненадежной, не записываемой численно. Тогда при фиксированной истинной концентрации $\xi < \xi_n$ вероятность явления $x > \xi_n$ тем меньше, чем меньше величина $\sigma(\Delta u)$, отражающая влияние случайных факторов. Но тогда при ограниченном числе измерений относительно часто величина x не будет записываться численно. Следовательно, с уменьшением $\sigma(\Delta u)$ уменьшается возможность использования описанной закономерности. С другой стороны, неограниченное увеличение $\sigma(\Delta u)$ заведомо увеличивает погрешность любых результатов. Отсюда следует вывод, что для получения максимальной точности оценки для $\xi < \xi_n$ должно быть некоторое оптимальное, отличное от нуля и бесконечности значение $\sigma(\Delta u)$.

Из сказанного следует, что при любом ξ_n можно дать оценку измеряемой величины ξ , если проводить достаточно большое число измерений. Поэтому нельзя принять распространенное на практике определение ξ_n как величины, ограничивающей область измеряемых значений ξ , без указания фактической надежности обнаружения концентрации $\xi = \xi_n$. Для более содержательной характеристики чувствительности методов измерений требуется указание функции, отображающей вероятность фиксации x при разных ξ . Для определенности и единообразия при ориентировочных сопоставлениях разных методов можно указывать, например, величину ξ , фиксируемую с вероятностью 1/2.

Следует признать, что влияние выбора ξ_n и другие затронутые в связи с этим вопросы еще недостаточно изучены. Поэтому далее мы рассматриваем случаи измерений лишь таких величин ξ , которые оцениваются с достаточно постоянной точностью, когда не требуется учет ξ_n .

Необходимое число измерений

Оценка необходимого числа измерений нужна для получения результатов определенной точности как в отношении измеряемых величин, так и в отношении оценок их погрешностей. В последнем случае имеется в виду число контрольных или повторных измерений. В связи с общностью математического аппарата мы для определенности будем говорить только о первом случае — оценке измеряемых величин. Будем считать, что исследователь имеет возможность проводить рекогносцировочные исследования (для предварительной ориентировочной оценки погрешностей) с последующим уточнением необходимого объема работ в процессе их проведения. Такой подход позволяет вовремя прекращать исследования, не делая излишних затрат. Это означает удовлетворение требованиям последовательного анализа, которые в общем виде освещены и достаточно обоснованы в литературе (Вальд, 1960). Поэтому они здесь не рассматриваются, а предполагаются выполненными.

Рассмотрим случай, когда требуется обеспечить определенную среднюю точность измерений отдельных значений ξ . Согласно изложенным выше положениям, при соблюдении определенных требований (в частности, к дискретности записей результатов измерений) для $u(x) | \xi$ справедливо равенство

$$D(\overline{\Delta u(x)}) = \frac{1}{m} D(\Delta u(x)). \quad (71)$$

Пусть $\Delta_c = 0$ и требуется, чтобы отличие $\overline{u(x)}$ от ξ не превышало по абсолютному значению величину Δ_m с надежностью не ниже Λ , т. е. полуширина доверительного интервала указанной надежности не должна превышать величину Δ_m . Это означает, что для достижения необходимой точности (без ее занижения или завышения) необходимо сделать такое число измерений, чтобы

$$k_\Lambda \cdot \sigma(\overline{\Delta u(x)}) = \Delta_m, \quad (72)$$

где k_Λ — полуширина доверительного интервала в долях σ (если u — нормализующая функция, то $k=1; 2; 3$ соответственно при $\Lambda=0,68; 0,95; 0,997$).

Поскольку $\sigma = \sqrt{D}$, то, учитывая равенство (71), получаем вместо (72):

$$k_\Lambda \cdot \sqrt{\frac{1}{m} D(\Delta u(x))} = \Delta_m. \quad (73)$$

Отсюда требуемое число измерений должно быть

$$m = \frac{k^2}{\Delta_m^2} \cdot D(\Delta u(x)). \quad (74)$$

Для нахождения Δ_m бывает нужно произвести дополнительные вычисления (в зависимости от способа задания требуемой точности).

Если p_a — стоимость единичного измерения, то, согласно равенству (74), найдем стоимость конечного результата — оценки значения ξ требуемой точности:

$$P_a = \frac{k^2}{\Delta_m^2} \cdot p_a \cdot D(\Delta u(x)). \quad (75)$$

Оценка отдельных значений ξ (например, концентраций элемента μ в геохимических пробах) может быть промежуточным этапом для оценки некоторого статистического параметра Ξ для генеральной совокупности (например, средней концентрации элемента μ в опробованном интрузиве). Тогда при определенных требованиях к точности оценки Ξ точность оценок ξ должна выражаться по-другому. Для первого приближения рассмотрим этот вопрос, ограничиваясь случаем, когда симметризирующие функции для $p(\xi) | \Xi$ и $p(\Delta x | \xi)$ одинаковы.

Тогда, полагая $\Delta_c = M(\Delta u(x)) = 0$, имеем:

$$u(\Xi) = M(u(\xi)) = M(u(\xi) + \Delta u(x)) = M(u(x)).$$

Под $M(u(x))$ здесь понимается величина, к которой сходится по вероятности оценка

$$\overline{u(x)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \cdot \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{m_i} u(x_{ij}),$$

где n — число значений ξ_i , m_i — кратность измерений величины ξ_i . Поэтому можно принять $\Xi = u^{-1}(\overline{u(x)})$. Далее для простоты берется $m_i = \text{const } (i) = m$.

Поскольку $\overline{u(x)} = u(\xi) + \overline{\Delta u(x)}$, то

$$D(\overline{u(x)}) = D(\overline{\Delta u(x)}) + D(u(\xi)). \quad (76)$$

Но $D(\overline{\Delta u(x)}) = \frac{1}{m} D(\Delta u(x))$. Поэтому, согласно равенству (76),

$$D(\overline{u(x)}) = \frac{1}{m} D(\Delta u(x)) + D(u(\xi)).$$

Дисперсия же величины $\overline{u(x)}$, являющейся средним из значений $\overline{u(x)}$, относящихся к n значениям ξ , в n раз меньше. Она определяет ошибку оценки величины $u(\Xi)$ по значениям $u(x)$:

$$D(\overline{u(x)}) = D(\overline{\Delta u(x)}) = \frac{1}{n} \left[\frac{1}{m} D(\Delta u(x)) + D(u(\xi)) \right]. \quad (77)$$

Отсюда находим погрешность оценки величины Ξ по $u(x)$:

$$\sigma(\overline{\Delta u(x)}) = \sqrt{\frac{1}{n} \left[\frac{1}{m} D(\Delta u(x)) + D(u(\xi)) \right]}. \quad (78)$$

Согласно этой формуле, увеличение n уменьшает погрешность резуль- тативной оценки (в пределе — до нуля), увеличение же m или снижение $D(\Delta u(x))$ при фиксированном n не может снизить погрешность ре- зультата ниже величины

$$\lim_{D(\Delta u(x)) \rightarrow 0} \sigma(\overline{\Delta u(x)}) = \lim_{m \rightarrow \infty} \sigma(\Delta u(x)) = \sqrt{\frac{1}{n} D(u(\xi))}.$$

Иными словами, высокая точность вещественного анализа проб практически бесполезна, если число проб слишком мало, а природная дисперсия значений $u(\xi)$ сравнительно велика.

Найдем формулы для оптимальных m и n . Аналогично равенствам (72) и (73), при задании определенной точности (значений Δ и Δ_m) для оценки Ξ на основании равенства (78) находим

$$k_{\Delta} \sqrt{\frac{1}{n} \left[\frac{1}{m} D(\Delta u(x)) + D(u(\xi)) \right]} = \Delta_m. \quad (79)$$

Отсюда найдем число значений ξ , которые должны быть измерены при некотором заданном m для получения оценки Ξ с заданной точностью:

$$n = \frac{k_{\Delta}^2}{\Delta_m^2} \left[D(u(\xi)) + \frac{1}{m} D(\Delta u(x)) \right]. \quad (80)$$

Пусть p_w — стоимость подготовки одной величины ξ к измерениям (отбор и обработка одной геохимической пробы), а p_a — стоимость одного измерения (однократного вещественного анализа одной пробы). Тогда стоимость работ определяется величиной

$$P_a = n p_w + n \cdot m \cdot p_a = n(p_w + m p_a). \quad (81)$$

Для нахождения минимальной величины P_a подставим в это выражение минимальное значение n , определяемое формулой (80):

$$P_a = \frac{k_{\Delta}^2}{\Delta_m^2} \left[D(u(\xi)) + \frac{1}{m} D(\Delta u(x)) \right] \cdot (p_w + m p_a). \quad (82)$$

Беря от этого выражения производную по m и приравнивая ее к нулю, найдем, при каком m может быть достигнут минимум P_a :

$$m = \sqrt{\frac{p_w \cdot D(\Delta u(x))}{p_a \cdot D(u(\xi))}}. \quad (83)$$

Подставляя это выражение в (80), найдем необходимое значение n :

$$n = \frac{k_{\Delta}^2}{\Delta_m^2} \left[D(u(\xi)) + \sqrt{\frac{p_a}{p_w} \cdot D(u(\xi)) \cdot D(\Delta u(x))} \right]. \quad (84)$$

Подставляя эти значения m и n в выражение (81), получим приближенно стоимость работ, выраженную через исходные условия:

$$P_a = \frac{k_{\Delta}^2}{\Delta_m^2} \left[p_w \cdot D(u(\xi)) + 2 \sqrt{p_w \cdot D(u(\xi)) \cdot p_a \cdot D(\Delta u(x))} + p_a \cdot D(\Delta u(x)) \right]. \quad (85)$$

или

$$P_a = \frac{k_{\Delta}^2}{\Delta_m^2} \left[\sqrt{p_w \cdot D(u(\xi))} + \sqrt{p_a \cdot D(\Delta u(x))} \right]^2.$$

Строго говоря, величины m и n не могут быть не целыми, и это можно учесть: сначала по формуле (83) вычисляется число m ; в случае дробного значения оно округляется в сторону увеличения до целого (округление в сторону уменьшения может нарушить требования к точности). Полученное целое число m подставляется в формулу (84) и находится число n , округляемое таким же образом. По найденным целым m и n с помощью формулы (81) находится P_a . Получаемое при этом уточнение обычно невелико, и далее в теоретических рассуждениях мы пренебрегаем им. Значение $D(u(\xi))$ для подстановки в формулы (83—85) при проектировании работ оценивается ориентировочно по предварительным данным, аналогиям и рекогносцировочным исследованиям, а затем уточняется в процессе работ.

Согласно выражениям (84) и (83), при увеличении $D(u(\xi))$ оптимальная величина n растет, а m убывает (до 1, так как ниже нее m не может быть в силу целостности).

Для геохимических исследований это означает, что при увеличении природной дисперсии оптимальная методика предполагает увеличение числа отбираемых проб и снижение требований к точности определения концентраций в каждой из проб в отдельности (уменьшение m и $1/D(\Delta u(x))$ приводит к одинаковому изменению точности окончательного результата). Весьма ориентировочная прикидка величины $D(u(\xi))$ по опыту предшествующих работ или даже взятие гарантированного (с некоторым априорным значением Λ) нижнего значения $D(u(\xi))$ позволяют снизить m или применить более экспрессный и дешевый метод по сравнению со случаем планирования работ без учета этих закономерностей. Точность конечного результата при этом не теряется и может даже улучшаться за счет увеличения n , согласно сказанному о формуле (78).

§ 3. ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОГО МЕТОДА ИЗМЕРЕНИЙ

Среди сравниваемых методов измерений оптимальным будем считать тот, для которого минимальна стоимость (P_a) получения окончательного результата при заданной точности.

Рассмотрим случай, когда все сравниваемые методы имеют одинаковые по типу законы распределения ошибок. Названия методов обозначим $\{A_j\}$ и расположим их в ряд в порядке убывания p_{aj} , т. е. стоимость единичного измерения p_{aj} j -м методом тем меньше, чем больше j . Те методы, у которых при такой ранжировке величина $D(\Delta u(x))$ не меньше, чем у какого-либо метода с более высоким значением j , выбывают из дальнейшего рассмотрения как неконкурентноспособные, так как они дают не меньшую погрешность при большей стоимости.

Обозначим через m_j кратность измерений, необходимую для достижения нужной точности j -м методом, а через $P_{\xi j}$ — стоимость этих измерений для одной величины ξ .

Рассмотрим вначале случай, когда требуется найти оптимальный метод при заданной точности результатов для оценки каждого значения ξ . Тогда задача сводится к нахождению j , при котором значение $P_{\xi j}$ минимально.

Учитывая равенство (75, § 2), можно написать:

$$P_{\xi j} = \frac{k^2}{\Delta_m^2} p_{aj} \cdot D(\Delta u(x_j)), \quad (1)$$

где x_j — общее обозначение результатов измерений j -м методом.

При одинаковых типах законов распределения ошибок (и любых поставленных требованиях к точности) величины k_Δ и Δ_m для сравниваемых методов одинаковы. Поэтому величина $P_{\xi j}$ всегда минимальна у того метода, у которого минимально значение

$$P_D = p_{aj} \cdot D(\Delta u(x_j)). \quad (2)$$

Соответствующее этому методу значение j обозначим J_m . Все методы с меньшими j (в прежнем смысле, более точные, чем A_{J_m}) оказываются неконкурентноспособными, так как даваемая ими точность достигается дешевле методом A_{J_m} при кратных измерениях. Методы же с $j > J_m$ остаются еще конкурентноспособными для части задач: если требования к точности окончательного результата настолько низки, что при вычислениях по формуле (74, § 2) получается $m_{J_m} < 1$, то из методов с $j = J_m, J_m + 1, J_m + 2, \dots$ выбирается наиболее дешевый, для которого при однократном измерении удовлетворяется требование к точности ре-

зультата. Таким образом, если обозначить через A_j оптимальный метод, то $J \geq J_m$.

Если требования точности поставлены в отношении значений Ξ (а не отдельных ξ), то, согласно сказанному в предыдущем разделе, с ростом $D(u(\xi))$ оптимальными становятся все более дешевые методы измерений. Методы, имеющие разные законы распределения ошибок, могут быть оптимальными в разных частях диапазона измерений.

В общем случае при необходимости оценить параметры распределения $p(\xi)$, при прочих равных условиях, следует отдавать предпочтение методам, имеющим распределение ошибок, близкое по типу к распределению изучаемых величин. В частности, для изучения природных распределений редких и рассеянных элементов, а также цветных металлов (вообще — «малых» элементов), концентрации которых распределяются в природе приближенно логнормально, благоприятно применять методы вещественного анализа с приближенно логнормальным распределением ошибок. Действительно: тогда для распределений ξ и $x|\xi$ симметризирующей является одна и та же функция $u \in U_z$, т. е. легко находятся параметры $\Xi = u(\xi) = u(x)$, $D(u(\xi)) = D(u(x)) - D(\Delta u(x))$. Этими параметрами определяется распределение $p(u(\xi))$, а следовательно, при соответствующих преобразованиях и распределение $p(\xi)$. Относительно просты в таком случае также корреляционный и регрессионный анализы, что уже отмечалось ранее (Дубов, 1964₃). Если же законы $p(\xi)$ и $p(\Delta x)$ имеют разные формы, то связи между их параметрами и параметрами распределения наблюдаемых значений $p(x)$ оказываются сложными.

Даже простейшая оценка R_D существенно меняет сложившиеся представления о сравнительных возможностях методов измерений. В частности, согласно вышеизложенному, во многих случаях более точными в отношении конечного результата при ограниченной допустимой стоимости следует признать экспрессные методы, считавшиеся ранее при любых условиях менее точными, чем сравнительно дорогие и малопродуктивные способы измерений.

Пример*. В табл. 5 приведены результаты подсчета ошибок анализа сорока проб на свинец, медь и молибден полярографическим и колориметрическим методами (считающимися обычно «точными»), а также экспрессным спектральным («приближенным», «полуколичественным»). Пробы готовились из гранита, спектрально чистого в отношении указанных элементов. В него добавлялись галенит, халькопирит и молибденит до образования необходимых концентраций соответственно свинца, меди и молибдена. В 20 пробах было 0,17% каждого из этих элементов, а в остальных 0,065% меди, столько же свинца и 0,0065% молибдена. От каждой пробы после тщательного перемешивания измельченного материала были отделены для каждой лаборатории по 20 дубликатов, зашифрованных в случайном порядке, т. е. произведена рандомизация. Ни один из исполнителей не знал, что производит анализ проб с заведомо известными концентрациями. Результаты такого строгого эксперимента оказались несколько неожиданными. Именно при этом эксперименте, на основании § 3, гл. 1 (п.п. 5 и 5а), было впервые установлено, что распределение ошибок колориметрического и полярографического методов анализа аппроксимируется логнормальным распределением, а не нормальным, как предполагалось ранее. Это было подтверждено также кратными измерениями концентраций в рядовых геохимических пробах.

* Эксперимент был поставлен при участии сотрудников Центральной геохимической экспедиции Казахского геофизического треста В. З. Фурсова, М. С. Тонкопия, И. М. Рабиновича и др.

Погрешности и стоимость единичных измерений концентраций различными методами

| Метод анализа | Элемент | Стоимость анализа, руб. | | Систематическое относительное отклонение (δ_c) | | Случайное относительное отклонение ($\delta_{ \Delta }$) | |
|--------------------------|----------|-------------------------|---------------|---------------------------------------------------------|---------------|------------------------------------------------------------|---------------|
| | | лаборатория 1 | лаборатория 2 | лаборатория 1 | лаборатория 2 | лаборатория 1 | лаборатория 2 |
| Полярнографический | Медь | 1,230 | 1,5500 | 1,05 | 1,09 | 1,15 | 1,26 |
| Полярнографический | Свинец | 1,590 | 2,2000 | 0,72 | 0,83 | 1,22 | 1,23 |
| Колориметрический | Молибден | 0,990 | 2,3900 | 0,56 | 0,24 | 1,22 | 1,89 |
| Экспрессный спектральный | Медь | 0,0158 | 0,0158 | 1,13 | 0,37 | 1,28 | 1,32 |
| | Свинец | 0,0158 | 0,0158 | 0,72 | 0,27 | 1,19 | 1,53 |
| | Молибден | 0,0158 | 0,0158 | 0,25 | 0,10 | 1,59 | 1,73 |

Примечание. Под лабораторией 1 подразумевается лаборатория Центральной геохимической экспедиции Казгеофизтреста; под лабораторией 2 подразумеваются разные лаборатории г. Алма-Аты. Стоимость экспрессного спектрального анализа на один элемент в лаборатории 1 взята из расчета официальной стоимости анализа одновременно на 38 элементов 0,6 руб. Для лаборатории 2 взята ориентировочно та же стоимость из-за отсутствия более точных официальных данных.

Погрешности единичных измерений (определяемые как отличие δ от 1) оказались в среднем ниже у «точных» методов, чем у экспрессного, но разница эта не так велика, как обычно предполагается. В некоторых случаях оценки погрешностей экспрессного спектрального анализа оказались даже равны или меньше оценок погрешностей колориметрического и полярнографического методов.

В частности, для полярнографического и экспрессного спектрального анализов на свинец в лаборатории 1 величины $|\delta_c - 1|$ оказались одинаковыми, а $|\delta_{|\Delta|} - 1|$ — для спектрального анализа ниже. Это различие, правда, лежит в пределах небольшого доверительного интервала, но приведенных данных достаточно для заключения об отсутствии принципиальных преимуществ по точности полярнографического и колориметрического методов перед экспрессным спектральным*.

При фактических значениях δ_c и высоких требованиях к точности исключение систематических ошибок необходимо у всех рассматриваемых методов. Точность же поправки зависит от случайных ошибок. Поэтому для сравнения возможностей рассматриваемых методов в целом ограничимся более детальным изучением только случайных погрешностей.

Некоторые пробы были подвергнуты независимым многократным измерениям, для чего исполнителям давались в случайном порядке многочисленные дубликаты. В качестве окончательного результата вычислялись средние геометрические значения (соответственно виду функции $u(x) = \lg(x)$). Точность этих значений возрастает ($\delta_{|\Delta|}$ убывает) с увеличением кратности измерений в хорошем соответствии с теорией.

На рис. 20 показано полученное при экспрессном спектральном анализе на медь фактическое изменение величин $\delta_{|\Delta|}$, подсчитанное для значений \bar{C} , которые получались при разных m различным комбинированием результатов единичных измерений, относящихся к одной величине ξ . Здесь же дана кривая теоретического изменения $\delta_{|\Delta|}$ с изменением m исходя из начального фактического значения погрешностей единичных измерений. Как видим, теоретическая кривая лежит внутри построено-

* Несоответствие фактической точности различных «точных» химических методов укоренившимся представлениям было замечено и другими исследователями (Grassman, 1966; и др.).

го около фактической кривой доверительного интервала надежностью $\Lambda=0,68$ (соответственно ширине интервала $\pm\sigma(|\Delta(\lg C)|)$), т. е. различие между этими кривыми несущественно при уровне значимости $1-0,68=0,32$. Тем более оно несущественно при более широких доверительных интервалах, в частности при часто применяющемся для оценки нулевой гипотезы интервале с $\Lambda=0,95$, при выходе из которого наблюдаемых расхождений нулевая гипотеза отвергается с уровнем значимости 0,05.

На этом основании подсчитаны стоимости достижения разной точности различными методами. Типичная картина показана на рис. 21: оказалось, что во всех исследованных случаях кривые стоимости для экспрессного спектрального анализа лежат ниже аналогичных кривых для полярографического и колориметрического методов. Таким образом, экспрессный спектральный анализ оказывается более выгодным для достижения высокой точности. Стоимость экспрессного спектрального анализа на один элемент зависит от числа элементов, изучаемых при одном сжигании пробы в электрической дуге. Но даже при ограничении измерений только одним элементом, когда стоимость одного измерения возрастает в первой лаборатории до 0,21 руб., экспрессный спектральный анализ уступает немного по конечной точности лишь колориметрическому анализу на молибден в той же лаборатории. Это нетрудно проверить по критерию оптимальности R_D .

Разумеется, могут существовать условия, когда экспрессный спектральный анализ менее выгоден. Это может быть, когда при относительно большой погрешности единичных измерений велика стоимость подготовки материала проб для кратных измерений (например, при ручном отборе мономинеральных фракций для анализа только на один элемент). Но всегда необходимо решать такой вопрос на основе объективного расчета.

Из изложенного выше следует также, что желательнее расширение

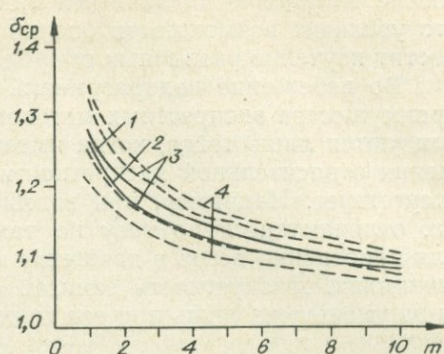


Рис. 20. Зависимость погрешности среднего геометрического оценок концентрации меди от числа измерений методом экспрессного спектрального анализа (фактические данные Центральной геохимической экспедиции Казахского геофизического треста).

1 — фактическая кривая; 2 — теоретическая кривая (при том же исходном значении δ единичного измерения); 3 — границы доверительного интервала $\pm\sigma$ (надежность 0,68, уровень значимости 0,32) для найденной зависимости по фактическим данным; 4 — аналогичные границы доверительного интервала $\pm 2\sigma$ (надежность 0,95, уровень значимости 0,05).

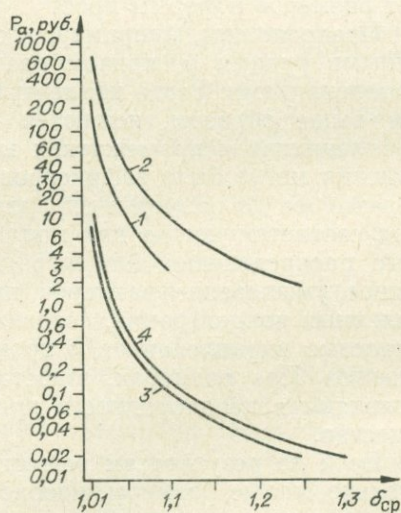


Рис. 21. Стоимость анализа на медь различными методами в зависимости от требуемой точности (допустимой средней ошибки). (Фактические данные организаций, указанных в табл. 5.)

P_a — стоимость результата измерений при допустимом среднем относительном отклонении δ ; 1, 2 — полярографический метод (соответственно лаборатории 1 и 2); 3, 4 — экспрессный спектральный анализ (соответственно лаборатории 1 и 2).

списка методов с различными видами распределения ошибок, так как это увеличит возможности оценки систематических погрешностей и упростит изучение различных природных распределений ξ .

Во избежание недоразумений еще раз подчеркнем, что указанные преимущества экспрессных методов с низкой стоимостью измерений реализуются лишь тогда, когда имеется возможность достаточного уменьшения относительной дискретности записей. Такая возможность иногда отсутствует. Например, при взвешивании нет смысла использовать гири, отличающиеся по весу на такую величину, которая недостаточна для приведения весов в движение из-за определенных сил трения в подшипниках. Дискретность записей обусловлена здесь трением и может быть уменьшена лишь при его снижении.

Глава III

ОЦЕНКА РАСПРЕДЕЛЕНИЙ КОНЦЕНТРАЦИЙ В ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

§ 1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Выше мы пользовались общепринятым понятием концентрации и в пробе как частного от деления количества μ в этой пробе на общее количество вещества в ней, т. е. на ее массу или объем. Теперь, для изучения полей, такого определения будет недостаточно: концентрации в пробах зависят не только от опробованного геохимического поля, но и от размеров и формы проб.

Предположим, например, что опробуются горные породы с вкрапленными рудами μ , причем размеры проб больше расстояний между вкрапленниками. Тогда концентрации μ в пробах, определенные указанным выше образом, являются средними между концентрациями во вкрапленниках и промежутках между ними. Эти концентрации без усреднения могут быть зафиксированы в пробах только при уменьшении их размеров до размеров вкрапленников и промежутков. Тогда появляются соответствующие два модальных значения на кривой статистического распределения концентраций и увеличивается дисперсия. Дальнейшее уменьшение размеров проб приводит к фиксации еще более различных концентраций, связанных с внутренним строением и неоднородностью вкрапленников и промежутков, т. е. к характеристике иных объектов. При размерах, сопоставимых с межатомными расстояниями, проявляются неоднородности кристаллической решетки и дискретность вещества.

Если по результатам вещественного анализа проб, имеющих относительно малые размеры, необходимо судить о процессах образования относительно крупных объектов, то требуется провести численное сглаживание влияния локальных процессов. В то же время для удобства описания любых распределений вещества желательно иметь понятие о концентрации в точке. Для этого примем следующие определения.

Точкой опробования (r), по существующей терминологии, будем называть геометрический центр пространства, которое занимал до отбора взятый в пробу материал.

Концентрацией вещества μ в точке r будем называть величину

$$C(r) = \lim_{\Delta v \rightarrow 0} \frac{\Delta q}{\Delta v},$$

где Δq — то количество μ , которое было бы в пробе, отобранной в точке r , если бы распределение вещества было непрерывным и не осложненным процессами, локальными по отношению к изучаемым: Δv — общее количество вещества в этой пробе при указанных условиях, \varnothing — ее диаметр.

Сказанное выше означает, что в зависимости от целей исследования и назначения изображений геохимических полей одной точке r могут соответствовать различные величины $C(r)$ концентраций μ . В частности, при изучении общего распределения рудного материала в пределах месторождения максимум $C(r)$ может быть указан примерно в центре месторождения, там, где была бы максимальная концентрация рудного вещества, если бы оно было непрерывным и его распределение не было нарушено более локальными процессами. При микроскопическом же изучении может оказаться, что, несмотря на группирование рудных минералов около этой точки, непосредственно в ней находится нерудное зерно.

Карты и графики имеют определенный масштаб, т. е. на них показываются лишь объекты, не слишком малые для изображения. Это наряду с масштабом съемки накладывает фактические ограничения на выбор изучаемых составляющих геохимических полей.

При теоретических исследованиях под количеством Δq удобно понимать соответствующую массу, а под Δv — объем. В практических же примерах обычно удобнее выражать $C(r)$ в вес. %. При постоянстве плотности (объемного удельного веса) вещества в исследуемом пространстве в обоих этих случаях бывает возможно пользоваться одними и теми же формулами для описания распределения μ . Далее это будет использоваться без оговорок. Под знаком % будут пониматься весовые проценты.

Если размеры пробы пренебрежимо малы (для поставленных целей), то, по принятой терминологии, она будет называться точечной.

Под областью, представленной какой-либо пробой, будем понимать область опробуемого пространства, в которой любая точка находится ближе к месту взятия этой пробы, чем к месту взятия любой другой, но на расстоянии, не превышающем половины максимально допустимого расстояния между точками опробования для заданного масштаба съемки.

Геохимические аномалии, являющиеся пространственными изменениями геохимических полей, будем иногда называть сигналами, соответственно используемой терминологии теории информации.

Аналогично частоте сигналов во времени введем пространственную частоту — число сигналов в расчете на единицу пространства. Соответственно объектам исследований, частота будет пониматься в статистическом смысле, так как расстояния между конкретными однотипными геологическими объектами нельзя считать вполне одинаковыми. Сигналы, служащие объектом изучения, назовем полезными (выделяемыми), а остальные — сигналами помех или просто помехами. Помехи с частотой, большей частоты полезных сигналов, будем называть также шумами. Вполне очевидно, что в зависимости от целей геохимических исследований одни и те же сигналы могут рассматриваться то как полезные, то как помехи. Например, при мелкомасштабном картировании протяженных горных пород и рудных провинций связанные с ними региональные изменения поля концентраций — полезные сигналы, ореолы же отдельных рудных тел и подобных по размерам нерудных объектов, а также более локальные флуктуации поля — помехи. Попадание или непопадание в них точек опробования при мелкомасштабных съемках случайно и может вызвать ошибки в оценке общих перспектив изучаемых территорий. При детальных же поисковых работах ореолы рудных тел являются, естественно, выделяемыми сигналами.

Ширину интервала расстояний, на которых значения поля в сигналах статистически коррелируются в существенной для исследований мере, будем называть радиусом корреляции этих сигналов.

При интерпретации результатов наблюдений следует иметь в виду, что выделение различных геохимических объектов и статистических совокупностей является в некоторой мере условным. Например, при опробовании двух контактирующих разновидностей горных пород может быть установлено бимодальное статистическое распределение μ в связи с четким различием статистических параметров соответствующих им совокупностей проб. При опробовании же большого района с частой перемежаемостью различных разновидностей пород, включающей и две упомянутых, может быть зафиксировано одно мономодальное распределение концентраций μ . Различие выделявшихся ранее разновидностей в общем распределении может стать незаметным в связи с наличием других разновидностей с промежуточными параметрами распределения μ . Условным является и само выделение разновидностей горных пород; они могут называться одинаково или объединяться в зависимости от точности исследований и требуемой детальности классификации: даже в одном образце горной породы, строго говоря, при высокой точности исследований могут быть найдены различия двух его половин, так как совпадение любых характеристик в двух различных точках имеет нулевую вероятность из-за действия хотя бы слабых, но бесконечных по числу природных факторов.

§ 2. СВЯЗЬ СТАТИСТИЧЕСКОГО И ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИИ КОНЦЕНТРАЦИЙ

Мы уже говорили о том, что главной целью геохимических исследований является получение сведений о распределении вещества в геологическом пространстве. Установление соответствия между точками опробованного пространства и концентрациями μ есть отображение собственно пространственного распределения. Соответствие же между концентрациями и вероятностями (или плотностями вероятностей) их встречи в опробованном пространстве дает статистическое распределение. Оно указывает характеристики совокупности точек в целом, без отражения различий отдельных точек этого пространства.

Обычно оба вида названных соответствий при геохимических исследованиях изучаются отдельно, по независимым построениям. Вполне очевидна теоретическая и практическая значимость установления связей между обоими этими видами распределений.

При изучении пространственного распределения (геохимического поля) предполагается, что пробы являются точечными. Это означает, что изучаются макронеоднородности геохимического поля, линейные размеры которых велики по сравнению с линейными размерами проб.

Однако поле имеет и микронеоднородности, линейные размеры которых хотя бы по одному измерению (толщине, ширине) малы по сравнению с размерами проб. Они проявляются как высокочастотная шумовая случайная составляющая поля, вызывая нарушения воспроизводимости результатов при повторном отборе аналогичных проб, т. е. обычно относятся к помехам.

Резкой грани между макро- и микронеоднородностями не существует. Однако на современном этапе исследований мы не рассматриваем детально промежуточных сигналов: они, будучи сопоставимыми с размерами проб, относятся к довольно узкой полосе частот и потому обычно влияют на результаты наблюдений гораздо меньше остальных сигналов, имеющих большую и меньшую протяженность. К тому же теоретическое исследование сигналов указанной полосы частот оказалось довольно сложным.

Макронеоднородности

Начиная с этого раздела производится смена условных обозначений: буквами x, y, z будут обозначаться пространственные координаты. Пространственное распределение концентраций в общем виде представляется как функция этих координат: $\xi = f(x, y, z)$, а для соответствующего ему статистического распределения остается прежнее обозначение $p(\xi)$.

Выражение статистического распределения через пространственное. Доля проб, в которых должна быть обнаружена концентрация $\xi \in (\xi_1; \xi_2)$, равна доле опробуемого пространства, занимаемой веществом с такой концентрацией. Следовательно,

$$P(\xi \in (\xi_1; \xi_2)) = \frac{V(\xi \in (\xi_1; \xi_2))}{V_0},$$

где V_0 — объем опробуемого пространства, $V(\xi \in (\xi_1; \xi_2))$ — объем тех частей пространства V_0 , где ξ лежит в указанных пределах. Пусть $V(C \leq \xi)$ — общий объем тех частей V_0 , где концентрация C не больше ξ . Тогда, согласно сказанному, функция статистического распределения (интегральная) определяется выражением

$$P(C \leq \xi) = \frac{V(C \leq \xi)}{V_0}, \quad (1)$$

а плотность вероятности встречи концентрации ξ

$$p(\xi) = \frac{\partial P(C \leq \xi)}{\partial \xi} = \frac{1}{V_0} \cdot \frac{\partial V(C \leq \xi)}{\partial \xi}. \quad (2)$$

Это и есть выражение статистического распределения через пространственное.

Рассмотрим для примера несколько случаев, когда пространство V_0 одномерно.

Если все опробуемое пространство заполнено веществом с одной концентрацией $\xi = \text{const}(x, y, z) = \xi'$, то $P(\xi \neq \xi') = 0$, а для $\xi = \xi'$ имеем: $p(\xi) d\xi = 1$, $p(\xi) = \infty$, т. е. $p(\xi)$ — это δ -функция Дирака. Этот пример для случая $V_0 = (x_m; x_s)$ показан на рис. 22.

Пусть теперь пространственное распределение концентраций является линейной функцией от координат:

$$\xi = \xi_1 + a \cdot (x - x_m), \quad (3)$$

где $a = \text{const}$. Эта функция изображена на рис. 23 линией I—I. Из

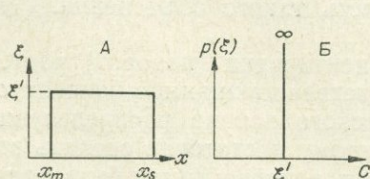


Рис. 22. Связь между пространственным и статистическим распределениями.

A — пространственное распределение при $\xi = \text{const} = \xi'$ во всем диапазоне значений $x \in (x_m; x_s)$; B — соответствующая этому случаю функция плотности вероятности встречи концентраций ξ (δ -функция Дирака).

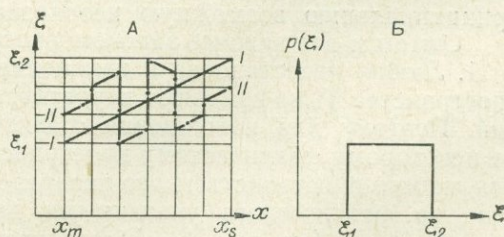


Рис. 23. Связь между пространственным и статистическим распределениями.

A — пространственные распределения концентраций между значениями ξ_1 и ξ_2 по законам I—I и II—II; B — соответствующая этим случаям функция плотности вероятности встречи концентраций ξ (равномерное статистическое распределение).

выражения (3) находим:

$$x = \frac{\xi - \xi_1}{a} + x_m.$$

В данном случае $V_0 = x_s - x_m$, $V(C \leq \xi) = x - x_m = \frac{\xi - \xi_1}{a}$,
 $\frac{\partial V(C \leq \xi)}{\partial \xi} = \frac{1}{a}$ и, согласно формуле (2),

$$p(\xi) = \frac{1}{a(x_s - x_m)}, \quad (4)$$

т. е. значение $p(\xi)$ одинаково для всех $x \in (x_s - x_m)$, отображая равномерное распределение.

Довольно распространенным является падение концентраций в горных породах приближенно по экспоненте (Моррис, Ловеринг, 1954; Дубов, 1963₁, 1963₂, 1964₁, 1966₂; Дубов, Найгебауэр, Соловьева, 1966; Соловов, 1966; и др.). Если оперировать значениями концентраций, из которых вычтен местный фон, то в таких случаях

$$\xi = \xi_0 \cdot e^{-\lambda(x - x_m)}. \quad (5)$$

При положительных значениях ξ_0 и λ величина падает с увеличением x , т. е. значения $C \leq \xi$ встречаются в области $V(C \leq \xi)$ от той точки x , где $C = \xi$, до x_s .

Логарифмируя выражение (5), получаем: $\ln \xi = \ln \xi_0 - \lambda(x - x_m)$,
откуда $x = \frac{\ln \xi_0 - \ln \xi}{\lambda} + x_m$; $V(C \leq \xi) = x_s - x = x_s - x_m - \frac{\ln \xi_0 - \ln \xi}{\lambda}$;

$$\frac{\partial V(C \leq \xi)}{\partial \xi} = \frac{1}{\lambda \xi};$$

$$p(\xi) = \frac{1}{\lambda \cdot \xi \cdot (x_s - x_m)}, \quad (6)$$

где $\xi \in (\xi_0; \xi_0 \cdot e^{-\lambda(x_s - x_m)})$. То есть в таком случае значения $p(\xi)$ обратно пропорциональны значениям ξ .

Поскольку пространственные распределения отражают определенные геохимические процессы, найденные зависимости дают возможность, зная процесс (и решение прямой задачи для него), предсказать обусловливаемое им статистическое распределение концентраций, т. е. физически объяснить наблюдаемое статистическое распределение. В то же время, поскольку одно и то же статистическое распределение может быть обусловлено различными пространственными, следует иметь в виду принципиальную возможную неоднозначность такого объяснения.

Отметим две важные закономерности.

1. Любая перестановка и изменение ориентировки (поворот) частей пространства V_0 не изменяют вероятностей встреч каких-либо концентраций. Поэтому для нахождения статистического закона распределения по некоторому фактическому пространственному достаточно сделать это для любого пространственного распределения, которое может быть получено из фактического указанными двумя операциями. В частности, график II—II (см. рис. 23, А) сводится таким образом к графику I—I (ориентировка одной из частей при этом должна быть изменена на обратную), и поэтому ему соответствует такое же статистическое распределение.

2. Согласно (1), максимумы $p(\xi)$ должны наблюдаться для тех ξ , при которых имеет максимумы функция $\frac{\partial V(C \leq \xi)}{\partial \xi}$.

Представим распределение ξ в виде поверхности $\xi = \xi(x, y, z)$. Тогда $d_{\xi}V(C \leq \xi)$ означает объем пространства между поверхностями равных концентраций $C = \xi$ и $C = \xi + d\xi$. Чем медленнее меняется ξ в пространстве (т. е. чем меньше $|\text{grad } \xi|$), тем этот объем больше. Поэтому величина $dV(C \leq \xi)/d\xi$ имеет максимумы при тех значениях ξ , при которых наблюдаются минимумы величины $|\text{grad } \xi(x, y, z)|$, т. е. при значениях ξ , наблюдаемых в экстремумах и участках минимального наклона функции $\xi(x, y, z)$. Если в отличном от нуля объеме ΔV величина ξ постоянна, то значение $p(\xi)$ для этой концентрации обращается в бесконечность. В точках же перегиба функции $\xi(x, y, z)$ величина $|\text{grad } \xi|$ имеет максимумы, а $p(\xi)$ — минимумы.

Многие процессы приводят к немонотонным изменениям градиентов концентраций. Например, простейшее одномерное диффузионное рассеяние материала бесконечно тонкого пласта в однородной среде приводит к распределению концентраций в ореоле по кривой Гаусса (Соловов, 1959). При этом градиент концентрации μ в максимуме ореола равен нулю; с удалением от максимума его абсолютная величина вначале растет, а затем вновь убывает, стремясь к нулю. На основании изложенного в таком поле распределение концентраций, отображаемое кривой $p(\xi)$ должно иметь два максимума: при $\xi = \xi_0$ и $\xi = \xi_m$, где ξ_0 — концентрация в максимуме ореола, ξ_m — фоновая концентрация (если она постоянна), — при минимуме, соответствующем концентрации в точках перегиба кривой $\xi(x)$.

Характеристика пространственного распределения по статистическому. Базисное распределение. Из изложенного выше следует, что в общем случае одному статистическому распределению может соответствовать бесконечное множество пространственных, отличающихся взаимным расположением и ориентировкой их частей. Лишь в случае, когда статистическое распределение выражается δ -функцией Дирака, пространственное распределение является вполне определенным, выражаемым функцией $C = \text{const}(x, y, z)$.

Несмотря на многозначность решений названной задачи, определенная информация при этом же может быть получена в связи с ограничением класса пространственных распределений, которые могут удовлетворять заданному статистическому.

Предположим, что исследуемое пространство V_0 разбито на точечные пробы, число которых неограниченно велико. Значения наблюдаемых при этом концентраций расположим в монотонный ряд в порядке невозрастания вдоль координатной оси абсцисс, которую обозначим V . Каждое значение концентрации будем относить к середине отрезка оси V , который отображает пространство, представляемое соответствующей пробой. Каждый отрезок начинается от конца предыдущего, за исключением того отрезка, который соответствует пробе с максимальной концентрацией: его начало поместим в точке $V = 0$. Очевидно, что определяемое по полученному графику значение $V = V(C > \xi)$ равно объему той части изучаемого пространства, где концентрация больше ξ .

Полученное для оси V простейшее пространственное распределение, удовлетворяющее заданному статистическому, является однозначно определенным. Назовем его базисным. Вполне очевидно, что оно совпадает по форме с фактическим пространственным распределением, если последнее монотонно, а пространство V_0 одномерно (опробование по линии). Как было указано, поворот и перестановка частей пространственного распределения не меняют тех его статистических характеристик, которые не зависят от взаимного положения различных его частей. В частности, остаются неизменными $\bar{\xi}$ и $D(\xi)$. Поэтому, как будет показано ниже, базисное распределение может быть использовано для получения важных сведений о характере фактического статистического распределения.

Операция упорядочения проб на оси V , описанная при определении базисного распределения, может быть применена к фактическим результатам вещественного анализа ограниченного числа проб. Это дает приближенное отображение функции базисного распределения.

Базисное распределение может быть построено и аналитически по функции статистического распределения. Покажем это.

Согласно формуле (2),

$$V(C \leq \xi) = V_0 \int_{\xi_m}^{\xi} p(C) dC. \quad (7)$$

Тогда

$$V(C > \xi) = V_0 - V(C \leq \xi) = V_0 \left(1 - \int_{\xi_m}^{\xi} p(C) dC \right) = f(\xi), \quad (8)$$

т. е. $V(C > \xi)$ есть некоторая определенная последним равенством функция $f(\xi)$. В связи с монотонностью этой функции можно найти и функцию, обратную ей. Поэтому, задаваясь различными ξ и вычисляя для них $V(C > \xi)$, получаем график базисного распределения концентраций:

$$\xi_0 = f^{-1}(V(C > \xi)). \quad (9)$$

Для теоретических исследований удобнее пользоваться нормированным базисным распределением (ξ'_0), не зависящим от величины V_0 . Для этого введем обозначение

$$V'(C > \xi) = \frac{V(C > \xi)}{V_0} = 1 - \int_{\xi_m}^{\xi} p(C) dC = 1 - P(C \leq \xi) = f'(\xi). \quad (10)$$

Тогда получаем требуемое:

$$\xi'_0 = f'^{-1}(V'(C > \xi)). \quad (11)$$

Для дальнейшего важно, что, согласно формуле (10), базисное распределение может строиться по результатам наблюдений через накопительную кривую. Это следует и непосредственно из его определения: поскольку левее точки V на оси абсцисс находятся только точки с более высокими значениями C , то можно строить кривую ξ_0 , задаваясь значениями ξ_0 на оси ординат и находя для них по данным наблюдений число $N(C > \xi_0) = 1 - N(C \leq \xi_0)$. Здесь $N(C \leq \xi_0)$ — числа, определяемые для обычной накопительной кривой.

Вместо C в выведенные формулы могут быть подставлены, разумеется, любые величины, а не только концентрации.

Пример. Найдем, какие пространственные (базисные) распределения могли бы привести к статистическим нормальному, логнормальному и g -нормальному распределениям.

Пусть величина z распределена нормально. Тогда

$$p(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma} \cdot \exp\left(-\frac{(z-\bar{z})^2}{2\sigma^2}\right),$$

где $\sigma = \sigma(z)$. Поскольку здесь $\xi_m = -\infty$, то, согласно (10), получаем:

$$V'(z > \xi) = \int_{-\infty}^{\xi} p(z) dz = \frac{1}{2} \left[1 - \Phi\left(\frac{\xi - \bar{z}}{\sigma}\right) \right].$$

Соответствующий этой функции график нормированного базисного распределения показан на рис. 24 (кривая 1, для $z=g$).

Беря антилогарифмы значений величины g , отображаемых кривой 1, получим такие значения G , что $\lg G = g$. Отнеся их к тем же значениям V' , построим график нормированного базисного распределения величины G , статистическое распределение которой логарифмически нормально (кривая 2).

Как и следовало ожидать, полученная кривая показывает, что в случае строго логнормального распределения концентрации в максимумах геохимических ореолов должны были бы быть бесконечно большими. Однако значительная часть кривой 2 имеет форму, довольно близкую к реальной.

Для нахождения нормированного базисного распределения величины, статистически подчиненной g -распределению, рассмотрим такую величину C , что значения $g = \lg \frac{C - C_m}{C_s - C} = \lg G$ распределены нормально. Из последнего равенства находим:

$$C = \frac{C_s \cdot \text{ant}(g) + C_m}{1 + \text{ant}(g)} = \frac{C_s \cdot G + C_m}{1 + G}.$$

Беря с кривых 1 и 2 величины g и G и задаваясь нужными C_m и C_s , находим для разных V' соответствующие значения C . Это дает кривую нормированного базисного распределения величины, статистическое распределение которой является g -нормальным. На рис. 24 таковой является кривая 3, построенная для $C_m = 0$, $C_s = 1$. Соответственно сказанному выше, g -распределение отражает фактическое распределение концентраций в геохимических полях лучше, чем нормальное и логнормальное распределения. Но при достаточном числе проб и соответствующей высокой точности статистических построений должно фиксироваться и его несоответствие с фактическим пространственным распределением. В частности, кривая концентраций базисного распределения, соответствующего статистическому g -распределению, подходит к оси ординат в максимуме под острым углом (см. рис. 24), в то время как в некоторых геохимических ореолах кривая концентраций в максимуме должна иметь горизонтальную касательную (см. гл. IV).

Наблюдаемые статистические распределения концентраций, вообще говоря, отличаются от природных в связи с наложением распределений ошибок, а также из-за усреднения концентраций в пределах того пространства, которое занимал отбираемый в пробу материал. Поэтому перед построением базисного распределения по статистическому следует вначале исключить из последнего распределение ошибок, для чего в соответствующих случаях можно использовать математический аппарат, описанный в § 2 гл. II*. Для исключения же пространственного усредне-

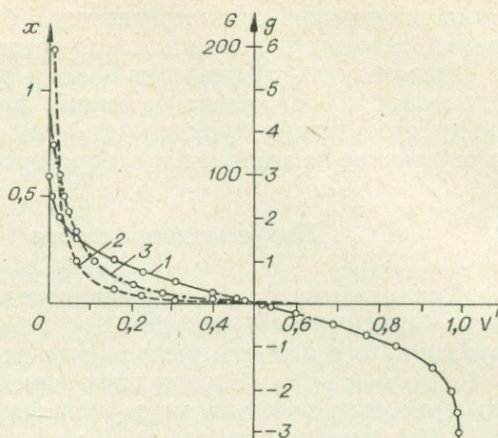


Рис. 24. Базисные распределения величин, подчиняющихся статистическому закону: 1 — нормированному нормальному (для g); 2 — логнормальному (для G); 3 — g -распределение (для C).

* Рассматривая закон распределения наблюдаемых значений изучаемой величины как композицию законов ее природного (истинного) распределения и распределения ошибок, можно выделить природное распределение и в других случаях с помощью аппарата решения обратных задач, аналогично описываемому в гл. V. Этот вопрос подробнее рассмотрен в работе (Дубов, 1969₃).

ния концентраций к построенному базисному распределению можно применить аппарат поправок на усреднение, освещаемый ниже в § 6.

Возможность исключения закона распределения ошибок измерений привлекает к построению базисного распределения по статистическому для характеристики функции $\xi(x, y, z)$ даже в тех случаях, когда известно положение каждой точки отбора проб.

Микронеоднородности

Как указывалось, микронеоднородности влияют на воспроизводимость (дисперсию) результатов геохимического опробования. Для изучения этого влияния разделим их на три крайних типа:

1. Точечные. Этому типу приблизительно соответствуют мелкие, примерно изометричные неоднородности состава горных пород (например, зерна кварца в граните). В качестве независимых случайных величин здесь выступают расстояния между неоднородностями и количество вещества в них.

2. Линейные. Этому типу приблизительно соответствуют линейно вытянутые (нитевидные, волокнистые) неоднородности, которые, несмотря на малое среднее расстояние друг от друга, могут иметь длину значительно больше размеров проб с гораздо более медленным изменением состава вдоль неоднородности, чем перпендикулярно ей. Линейные неоднородности можно представлять в виде серий линий определенного направления. В качестве независимых случайных величин здесь выступают расстояния между этими линиями и количество вещества, приходящегося на единицу длины различных линий (вдоль линии оно принимается неизменным).

3. Плоскостные. Этому типу приблизительно соответствуют системы плоскостей трещин горных пород, заполненных различными веществами, причем размеры плоскостей велики по сравнению с размерами проб. В качестве независимых случайных величин, влияющих на концентрации в пробах, здесь выступают расстояния между неоднородностями и количество вещества, приходящегося на единицу их площади.

Фактическое распределение неоднородностей в горных породах является комбинацией этих трех типов. Например, известные случаи нахождения касситерита в виде отдельных кристаллов на стенках трещин определенных систем можно рассматривать как сочетание первого и третьего типов. Наличие двух или более систем трещин, заполненных рудным веществом и пересекающихся по параллельным линиям с особым обогащением мест пересечений, является сочетанием второго и третьего типов. Беспорядочные обогащенные пересечения различных каналов и трещин, расположенных в разных направлениях, — явное сочетание всех трех типов. Рассеяние атомов в породе без определенного порядка — первый тип неоднородностей.

Пусть каждая проба имеет форму прямоугольного параллелепипеда. Рассмотрим две группы проб: группу $\{g\}$ с размерами ребер l_x, l_y, l_z и группу $\{G\}$ с размерами ребер kl_x, ml_y, nl_z . Концентрации в пробах этих групп обозначим соответственно C_g и C_G . Каждую пробу второй группы представим состоящей из kmn проб первой группы. Тогда

$$C_G = \frac{1}{kmn} \sum_{g=1}^{kmn} C_g. \quad (12)$$

Согласно теореме о дисперсии линейной функции,

$$D(C_G) = \frac{1}{(kmn)^2} \sum_{i=1}^{kmn} \sum_{j=1}^{kmn} K_{ij}, \quad (13)$$

где $K_{ij} = M((C_i - \bar{C}) \cdot (C_j - \bar{C}))$; C_i и C_j — концентрации в пробах с индексами $g=i$ и $g=j$, входящих в пробу G ; $\bar{C} = C_G$.

При неоднородностях первого типа все C_g можно считать независимыми, т. е. $K_{ij} = D(C_g)$ при $i=j$ и $K_{ij} = 0$ при $i \neq j$.

Тогда дисперсия, связанная с микронеднородностями,

$$D(C_G) = \frac{D(C_g)}{kmn}. \quad (14)$$

Для рассмотрения влияния неоднородностей второго типа представим, что направление l_z совпадает с направлением вытянутости неоднородностей. Тогда пробы $\{g\}$, находящиеся в пробе G в одном ряду, параллельном l_z , имеют одинаковую концентрацию (для них $K_{ij} = D(C_g)$) как при $i=j$, так и при $i \neq j$. Для каждого ряда (из n проб совокупности $\{g\}$) существует n^2 таких значений K_{ij} (включая случай $i=j$). Число таких рядов равно km . Для всех же i и j , относящихся к пробам в разных рядах (некоррелирующихся), $K_{ij} = 0$. Учитывая это, получаем из формулы (13):

$$D(C_G) = \frac{1}{(kmn)^2} \cdot kmn^2 \cdot D(C_g) = \frac{D(C_g)}{km}. \quad (15)$$

Для изучения влияния неоднородностей третьего типа ориентируем l_y и l_z параллельно плоскостям этих неоднородностей. Тогда $K_{ij} = D(C_g)$ для тех индексов i и j , которые принадлежат пробам из $\{g\}$, относящихся в G к одному слою, параллельному плоскостям неоднородностей. Для каждого такого слоя можно вычислить $(mn)^2$ значений K_{ij} (включая случай $j=i$). Число таких слоев равно k . Учитывая, что для всех i и j , относящихся к разным слоям, $K_{ij} = 0$, получаем, согласно (13):

$$D(C_G) = \frac{1}{(kmn)^2} \cdot k(mn)^2 \cdot D(C_g) = \frac{D(C_g)}{k}. \quad (16)$$

Согласно формулам (14—16), в случае неоднородностей первого типа увеличение представительности проб одинаково при увеличении любого из размеров. Тогда изометричные пробы в этом отношении не менее эффективны, чем любые другие. В случае же неоднородностей второго и третьего типов для увеличения представительности проб необходимо увеличение их размеров в направлениях, перпендикулярных вытянутости неоднородностей (для увеличения соответственно km или k в формулах (15) и (16)).

Существующая методика бороздowego опробования, принятая в разведочной геологии (с расположением борозд вкрест простиранию рудных тел), частично учитывает это правило, так как неоднородности в рудных телах вытянуты преимущественно по их простиранию. В зависимости от ожидаемого соотношения неоднородностей разных типов и ориентировок должно выбираться оптимальное соотношение глубины, ширины и общего числа борозд (длина борозд обычно фиксирована, и их число отражает общую длину, т. е. величину k). Это соотношение может оцениваться по опыту работ на объектах аналогичных типов и рекогносцировочными исследованиями с помощью неизометричных проб различной ориентировки.

Визуально не заметные и определяемые по геохимическим пробам форма и ориентировка неоднородностей сами по себе могут представлять интерес, например для разделения горных пород, сходных по внешнему облику и концентрациям. Некоторую характеристику этой формы можно получить с помощью простейшего опробования изометричными пробами по зависимости дисперсии концентраций в них от их размеров.

Если пробы кубичны, то $l_x=l_y=l_z=L$, $k=m=n$. Тогда, согласно формуле (14), при неоднородностях первого типа

$$D(C_G) = \frac{D(C_g)}{k^3}. \quad (17)$$

В качестве проб $\{g\}$ представим кубы с ребром в единицу длины, в качестве проб G — кубы с ребром L единиц длины; дисперсию обнаруживаемых в них концентраций обозначим соответственно $D_1(C)$ и $D_L(C)$. Тогда, согласно формуле (17), получим:

$$D_L(C) = D_1(C) \cdot L^{-3}. \quad (18)$$

Аналогично при втором типе неоднородностей:

$$D_L(C) = D_1(C) \cdot L^{-2}. \quad (19)$$

и при третьем типе неоднородностей:

$$D_L(C) = D_1(C) \cdot L^{-1}. \quad (20)$$

Если плотность пород колеблется незначительно, то вместо размеров изометричных проб можно использовать их вес p ; поскольку значение p пропорционально L^3 , значение L пропорционально $p^{1/3}$. Обозначая через $D_p(C)$ дисперсию концентраций, фиксируемую по пробам веса p , а через $D_1(C)$ — дисперсию концентраций, фиксируемую по пробам единичного веса, получаем для неоднородностей первого типа:

$$D_p(C) = D_1(C) \cdot p^{-1},$$

для неоднородностей второго типа:

$$D_p(C) = D_1(C) \cdot p^{-2/3},$$

и для неоднородностей третьего типа:

$$D_p(C) = D_1(C) \cdot p^{-1/3}.$$

Для неоднородностей же произвольного типа, являющихся сочетанием трех указанных,

$$D_L(C) = D_1(C) \cdot L^{-z},$$

где $Z \in (3; 1)$;

$$D_p(C) = D_1(C) \cdot p^{-z}, \quad (22)$$

где $z \in (1; 1/3)^*$.

Пределы возможных значений Z и z найдены в предположении, что названные выше в качестве случайных величин характеристики распределения вещества по неоднородностям не коррелированы между собой. В действительности же между ними может наблюдаться корреляция. Чем она больше, тем меньше отличаются $D(C_g)$ и $D(C_G)$. Наконец, при полной линейной корреляции, когда $K_{ij} = \text{const} (i, j) = D(C_g)$, получаем, согласно приведенным формулам, $D(C_G) = D(C_g)$. Тогда $D_L(C) = D_1(C)$ и $D_p(C) = D_1(C)$. Согласно формулам (21) и (22), это возможно только при $Z = z = 0$. Следовательно, в произвольном случае $Z \in (3; 0)$, $z \in (1; 0)$.

Для оценки параметров D_1 и Z (или D_1 и z) необходимы результаты вещественного анализа проб различных размеров.

* Точнее говоря, величины L и p здесь являются соответственно не размером и весом проб, а отношением размера и веса к величинам, принятым за единицу. Это важно с точки зрения размерностей.

Пусть в каждой точке опробования отобраны пробы двух совокупностей* соответственно с размерами $L=L_1$ и $L=L_2$, причем по первой совокупности найдена общая дисперсия $D(u(C_1))$, а по второй — $D(u(C_2))$, где $u \in U_z$ — функция, симметризирующая результативные ошибки (связанные и с измерениями, и с микронеоднородностями). Обозначим: $D_0(u(C))$ — дисперсия величин $u(C)$ в макронеоднородностях; $D_{L_1}(u(C))$ и $D_{L_2}(u(C))$ — дисперсии этих же величин, связанные с микронеоднородностями (соответственно для двух совокупностей проб); $D(u(C_1) - u(C_2))$ — дисперсия разностей величин $u(C)$, зафиксированных по парам проб разных совокупностей (в общих точках отбора). Тогда приближенно можно считать, что

$$\begin{aligned} D(u(C_1)) &= D_0(u(C)) + D_{L_1}(u(C)) \\ D(u(C_2)) &= D_0(u(C)) + D_{L_2}(u(C)) \\ D(u(C_1) - u(C_2)) &= D_{L_1}(u(C)) + D_{L_2}(u(C)). \end{aligned} \quad (23)$$

Эта система уравнений является лишь приближенной, так как, строго говоря, с изменением размеров проб при переходе от первой совокупности ко второй некоторая часть неоднородностей переходит из класса микронеоднородностей в класс макронеоднородностей и наоборот. Кроме того, здесь принято, в первом приближении, отсутствие корреляции между макро- и микронеоднородностями.

Величины, стоящие в левых частях уравнений системы (23), вычисляются непосредственно по результатам опробования. После этого, пользуясь аналогией этой системы с системой уравнений (21, § 2, гл. II) и решениями (22, § 2, гл. II), находим неизвестные $D_0(u(C))$, $D_{L_1}(u(C))$ и $D_{L_2}(u(C))$.

В каждой точке можно брать по две пробы каждого из размеров L_1 и L_2 . Тогда дисперсии $D_{L_1}(u(C))$ и $D_{L_2}(u(C))$ вычисляются по таким же формулам, которые использовались для парных равноточных измерений. В этом случае, при пренебрежении ошибками измерений,

$$\begin{aligned} D_{L_1}(u(C)) &= \frac{1}{2(n-1)} \sum_{i=1}^n (u(C'_{i1}) - u(C''_{i1}))^2, \\ D_{L_2}(u(C)) &= \frac{1}{2(n-1)} \sum_{i=1}^n (u(C'_{i2}) - u(C''_{i2}))^2, \end{aligned}$$

где C'_{i1} и C''_{i1} — концентрации в первой и второй пробах первой совокупности (одинаковых размеров), взятых в i -й точке, а C'_{i2} и C''_{i2} — то же, для проб второй совокупности.

По величинам $D_L(u(C))$ (или $D_p(u(C))$) находятся, в случае необходимости, значения $D_L(C)$. Если $u(C) = \lg(C)$, то для этого используется простое преобразование (см. § 2, гл. I).

Если дисперсия ошибок измерений составляет существенную долю от D_{L_1} или D_{L_2} , то необходимо ее исключение. Полученные в результате величины (для них мы оставляем те же обозначения) и используются для нахождения $D_1(C)$ и Z ; тогда можно составить два уравнения с известными левыми частями:

$$\begin{aligned} D_{L_1}(C) &= D_1(C) \cdot L_1^{-Z}; \\ D_{L_2}(C) &= D_1(C) \cdot L_2^{-Z}. \end{aligned}$$

Логарифмируя эти выражения и решая получаемую систему линейных

* Здесь и далее в подобных случаях мы используем для краткости терминологию, принятую при геохимическом опробовании: пробы называются взятыми в одной точке, когда фактические (никогда не совпадающие) точки их отбора расположены на расстоянии, пренебрежимо малом по сравнению с изучаемыми изменениями поля.

уравнений, находим:

$$Z = \frac{\lg D_{L_1}(C) - \lg D_{L_2}(C)}{\lg L_2 - \lg L_1} = \frac{\lg((D_{L_1}(C))/(D_{L_2}(C)))}{\lg(L_2/L_1)};$$

$$\lg D_1(C) = \frac{\lg D_{L_1}(C) \cdot \lg L_2 - \lg D_{L_2}(C) \cdot \lg L_1}{\lg L_2 - \lg L_1};$$

$$D_1(C) = \text{ant} \left(\frac{\lg D_{L_1}(C) \cdot \lg L_2 - \lg D_{L_2}(C) \cdot \lg L_1}{\lg(L_2/L_1)} \right).$$

Аналогично: если отобраны изометричные пробы двух весов p_1 и p_2 , то можно найти

$$z = \frac{\lg((D_{p_1}(C))/(D_{p_2}(C)))}{\lg(p_2/p_1)}; \quad (24)$$

$$D_1(C) = \text{ant} \left(\frac{\lg D_{p_1}(C) \cdot \lg p_2 - \lg D_{p_2}(C) \cdot \lg p_1}{\lg(p_2/p_1)} \right). \quad (25)$$

При приближенно логнормальном распределении концентраций может представлять интерес дисперсия логарифмов концентраций как устойчивая характеристика геохимического поля. В таком случае, пользуясь выражением дисперсии случайной величины через дисперсию ее логарифма (см. § 2, гл. 1), получаем вместо (22):

$$D_p(\lg C) = \lg e \cdot \lg \left[\left(\text{ant} \left(\frac{D_1(\lg C)}{\lg e} \right) - 1 \right) \cdot p^{-z} + 1 \right].$$

Если по результатам вещественного анализа проб (с исключением дисперсии, связанной с ошибками измерений) найдены $D_{p_1}(\lg C)$ и $D_{p_2}(\lg C)$, то вместо (24) имеем:

$$z = \frac{\lg \left(\left(\text{ant} \left(\frac{D_{p_1}(\lg C)}{\lg e} \right) - 1 \right) / \left(\text{ant} \left(\frac{D_{p_2}(\lg C)}{\lg e} \right) - 1 \right) \right)}{\lg(p_2/p_1)}.$$

Поскольку $z \in (0; 1)$, то для грубо ориентировочных прикидок можно принимать $z = 1/2$; при этом множитель p^z в соответствующих формулах будет завышен или занижен максимум в \sqrt{p} раз. Аналогичным образом можно написать выражение для $D_1(\lg C)$; мы не приводим его в связи с очевидностью и громоздкостью. Подобные формулы получаются и при характеристике размеров проб линейными величинами.

На первый взгляд может показаться, что при логнормальном распределении концентраций можно непосредственно подставить $\lg C$ вместо C в формулы (21) и (22). Строго говоря, это не так, поскольку сделанные выводы базировались на аддитивности концентраций, чем не обладают логарифмы концентраций: концентрация в средней пробе, т. е. смеси материала ряда проб, равна их средней (средневзвешенной) концентрации; логарифм же концентрации в средней пробе не равен среднему значению логарифмов их концентраций. Это видно, если взять логарифм выражения (12). Поэтому подстановка $D(\lg C)$ вместо $D(C)$ в приведенных формулах при логнормальном распределении возможна лишь в первом приближении. Это использовалось нами для принципиальной проверки зависимости представительности проб от их веса.

Строго говоря, величина z зависит от размеров проб (по тем же причинам, по которым система (23) является не точной, а приближенной). Поэтому, при возможности варьирования L и p в широких пределах, желательно отражать зависимость z от этих величин. Это можно сделать на основании вещественного анализа малых проб, отбираемых на разных расстояниях друг от друга, используя автокорреляционную зависимость (13).

Согласно приведенным теоретическим положениям, величина $D_L(C)$ непрерывно уменьшается, стремясь к нулю, с увеличением размеров проб. Это было проверено экспериментально в полевых условиях (совместно с В. З. Фурсовым и М. С. Тонкопием). В распространенной же литературе обычно рекомендуется некоторый оптимальный вес проб, превышение которого не приводит к увеличению точности. Это связано с тем, что ранее было принято судить о влиянии размеров проб лишь по $D(C)$ — общей дисперсии фиксируемых концентраций.

Представим $D(C) = D_0(C) + D_L(C)$. Тогда становится очевидным, что при $D_0(C) \gg D_L(C)$ относительное изменение дисперсии $D(C)$, вычисляемой для всей совокупности проб из изучаемого пространства, оказывается незаметным при существенном изменении величины $D_L(C)$. Между тем, точность оценок концентраций в изучаемом поле определяется именно величиной $D_L(C)$. Следовательно, оценка влияния размеров проб должна производиться не по $D(C)$, а по величине $D_L(C)$, которая находится с помощью дисперсионного анализа.

Сделаем еще одно замечание: большое число малых проб может полностью заменить, благодаря пересчетам, малое число больших проб; по малому же числу больших проб нельзя получить детальную характеристику поля. Чрезмерное же уменьшение размеров проб вызывает опасность существенного их заражения другим материалом при обработке, а рост числа проб влечет повышение расходов на вещественный анализ. Поэтому вопрос об оптимальных размерах проб должен включать экономическую оценку.

§ 3. СМЕЩЕНИЕ СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ

Влияние представительности проб и точности измерений

Основная характеристика любого объекта геохимических исследований — математическое ожидание концентрации μ в нем — величина $M(C)$. В качестве оценки этой величины обычно берется среднее арифметическое из C_i — оценок концентраций ξ_i , получаемых при опробовании*. В частности, так вычисляются кларки.

Для вычисления некоторых характерных концентраций, по принятым на практике положениям, рекомендуется учитывать статистический закон распределения μ и вычислять ту оценку концентрации, которая соответствует ее нормально распределенной функции. Например, в качестве оценки так называемого геохимического фона элементов, распределенных приближенно логнормально, рекомендуется вычислять среднее геометрическое из оценок концентраций — антилогарифм среднего логарифма («Инструкция по геохимическим методам поисков рудных месторождений», 1965). Оценка, вычисляемая по такой рекомендации, является медианой, если закон распределения ошибок измерений совпадает с законом распределения измеряемых величин. В общем же случае обе названные оценки могут быть существенно смещенными и даже несостоятельными. Уточнение возможно при учете законов распределения ошибок и самих измеряемых величин. Покажем это.

Предварительно напомним, что в изучавшихся выше случаях при $\Delta_c = 0$ ошибки измерений не смещали медианную оценку, но могли смещать среднее арифметическое из результатов измерений. Однако сейчас

* Напомним, что мы рассматриваем результаты равномерного опробования или сведенные к ним результаты неравномерного опробования с соответствующими поправками на статистический вес проб. Поэтому мы говорим только о среднеарифметическом, а не средневзвешенном значении.

рассматривается более сложный случай, когда необходимо учесть, кроме ошибок измерений, также природное распределение изучаемых величин.

Обозначим: \mathcal{V} — объем опробуемого объекта; Q — масса μ в \mathcal{V} ; n — число проб, взятых из \mathcal{V} ; $v_i = \text{const } (i) = v$ — объем i -й пробы; ξ_i — концентрация μ в ней.

При увеличении n до значения, равного $n_s = \mathcal{V}/v$, весь опробуемый объект оказывается разделенным на пробы. Тогда независимо от v и закона распределения μ имеем:

$$Q = \sum_{i=1}^{n_s} \xi_i \cdot \mathcal{V}^i,$$

$$\frac{Q}{\mathcal{V}^i} = \frac{1}{\mathcal{V}^i} \sum_{i=1}^{n_s} \xi_i \cdot v_i = \frac{v}{\mathcal{V}^i} \sum_{i=1}^{n_s} \xi_i = \frac{1}{n_s} \sum_{i=1}^{n_s} \xi_i = \bar{\xi} \text{ и } Q = \bar{\xi} \cdot \mathcal{V}^i.$$

Иными словами, каким бы ни был закон распределения концентраций, только величина $\bar{\xi}$, будучи умноженной на \mathcal{V} , дает количество (геологические запасы) μ в объекте. Любая же другая статистика, не сходящаяся к ней, является, строго говоря, несостоятельной для такой цели. В том числе это означает несостоятельность среднего геометрического (\bar{C}) из результатов измерений концентраций C при приближенно логнормальном их распределении ($\bar{C} = \text{ant}(\lg \bar{C})$) иногда используется в качестве основной характеристики объекта в таких случаях только потому, что $\lg C$ для логнормального распределения играет роль величины C для нормального). Это будет разобрано подробнее несколько ниже.

Состоятельной оценкой для вышеуказанной величины $\bar{\xi}$ является средняя арифметическая концентрация μ для выборки $n < n_s$ проб. Эту оценку мы также обозначаем $\bar{\xi}$. Тогда $\xi_{\text{ме}}$ при асимметричном распределении — несостоятельная оценка, поскольку она не сходится к среднему арифметическому.

Абсолютная разность $|\xi_{\text{ме}} - \bar{\xi}|$ для асимметричного закона $p(\xi)$, как известно, статистически увеличивается с увеличением $D(\xi)$. В свою очередь, $D(\xi)$ увеличивается с уменьшением размеров проб. Но $\bar{\xi} = Q/\mathcal{V}^i$ не зависит от размеров проб. Следовательно, изменение разности $|\xi_{\text{ме}} - \bar{\xi}|$ означает здесь только изменение $\xi_{\text{ме}}$ с изменением размеров проб, т. е. смещение оценки $\xi_{\text{ме}}$ относительно любой величины, характеризующей действительное (природное) распределение концентраций в \mathcal{V} . Для наших целей важно, что это смещение не исчезает при увеличении n .

В частности, при логнормальном распределении значений ξ , когда $\xi_{\text{ме}} = \bar{\xi}$, согласно формуле (21, § 2, гл. I), можно написать при большом n , применяя обозначение оценки $\bar{\xi}$ вместо $M(\xi)$:

$$\xi_{\text{ме}} = \bar{\xi} = \bar{\xi} \cdot \text{ant}(-D(\lg \xi)/(2 \lg e)). \quad (1)$$

С уменьшением размеров проб величина $D(\xi)$ растет в связи с появлением относительно высоких и низких концентраций. Но тогда растет и $D(\lg \xi)$. Поскольку $\bar{\xi}$ не зависит от v , то, согласно формуле (1), это означает уменьшение $\bar{\xi}$ с уменьшением размеров проб.

В действительности ошибки не равны нулю, и в общем случае фиксируемые при наблюдениях концентрации не равны истинным, т. е. $C_i \neq \xi_i$, причем известны не величины $\xi_{\text{ме}}$ и $\bar{\xi}$, а их оценки $C_{\text{ме}}$ и \bar{C} . Однако ошибки не могут устранить смещение, и, следовательно, согласно изложенному, $C_{\text{ме}}$ при асимметричном распределении значений ξ_i , как и величина $\xi_{\text{ме}}$, является несостоятельной оценкой.

При больших размерах проб и малых градиентах геохимического поля величина $D(\lg \xi)$ может стать очень малой. Но это означает, как было показано в гл. I, что асимметрия распределения значений ξ_i мала и закон $p(\xi)$ можно считать приближенно нормальным. Тогда $\tilde{\xi} \approx \bar{\xi}$, и необходимость учета логнормальности распределения значений ξ_i отпадает. Если же $v \rightarrow 0$, то минимальное фиксируемое в пробах значение ξ_i также стремится к нулю. Для такого значения $\lg \xi_i \rightarrow -\infty$, что означает $D(\lg \xi) \rightarrow \infty$ и, согласно формуле (1), $\tilde{\xi} \rightarrow 0$, $\xi - \bar{\xi} \rightarrow -\bar{\xi}$, т. е. смещение оценки $\tilde{\xi}$ может быть большим.

Таким образом, вычисляемая по результатам вещественного анализа проб величина $C_{\text{ме}}$ при существенной асимметрии распределения значений ξ_i является несостоятельной оценкой для ξ (или $M(\xi)$).

С другой стороны, при асимметричном распределении ошибок и существенной величине $D(\Delta C)$, согласно сказанному в гл. I и II, оценка \bar{C} является несостоятельной в связи со смещением, вызываемым ошибками. Не смещается же случайными ошибками измерений величина $C_{\text{ме}}$ (систематическая погрешность предполагается исключенной).

Поэтому для получения окончательных оценок, не смещенных влиянием ни размеров проб, ни ошибок измерений, можно воспользоваться выражением $\bar{\xi}$ через величину $\xi_{\text{ме}}$, оцениваемую из результатов измерений как $C_{\text{ме}}$.

В частности, при логнормальном распределении значений ξ_i и ошибок измерений имеем, согласно формуле (1):

$$\bar{\xi} = \tilde{\xi} \cdot \text{ant} (D(\lg \xi)/(2 \lg e)) = \tilde{C} \cdot \text{ant} ((D(\lg C) - D(\Delta \lg C))/(2 \lg e)). \quad (2)$$

Поскольку $\tilde{C} = \text{ant}(\overline{\lg C})$, то, согласно (2),

$$\bar{\xi} = \text{ant} \left(\overline{\lg C} + \frac{D(\lg C) - D(\Delta \lg C)}{2 \lg e} \right). \quad (3)$$

(Здесь использовано равенство $D(\lg \xi) = D(\lg C) - D(\Delta \lg C)$, основанное на том, что в данном случае функция \lg является нормализующей для ошибок измерений, т. е. принадлежит классу U_z .)

Статистические параметры, стоящие в правых частях формул (2) и (3), вычисляются непосредственно по результатам измерений, т. е. эти формулы являются рабочими для распространенного случая, когда величины C_i и ошибки их измерений распределены по приближенно логнормальному закону (тогда и величины ξ_i распределены приближенно логнормально).

При большой природной дисперсии и относительно малом влиянии ошибок измерений на общую дисперсию результатов, т. е. при $D(\lg \xi) \gg D(\Delta \lg C)$, когда величиной $D(\Delta \lg C)$ в формуле (2) можно пренебречь по сравнению с $D(\lg C)$, имеем:

$$\bar{\xi} \approx \tilde{C} \cdot \text{ant} ((D(\lg C))/(2 \lg e)) = \bar{C}. \quad (4)$$

Если же, наоборот, $D(\Delta \lg C) \gg D(\lg \xi)$, то $D(\lg C) = D(\lg \xi) + D(\Delta \lg C) \approx D(\Delta \lg C)$, $D(\lg C) - D(\Delta \lg C) \approx 0$ и, согласно формуле (2),

$$\bar{\xi} = \tilde{C}. \quad (5)$$

Таким образом, вид оценки содержания μ в изучаемом объекте зависит здесь от соотношения природной дисперсии концентраций и дисперсии ошибок их измерений (и от типа распределения ошибок). Это означает целесообразность уточнения существующих инструктивных требований: если дисперсия измеряемых концентраций заведомо велика по сравнению с дисперсией ошибок измерений, то для получения простейшей статистической оценки величины $M(\xi)$ следует вычислять

среднее арифметическое из результатов измерений (\bar{C}), а при обратном соотношении дисперсий — медианное значение ($C_{\text{ме}}$). Зависимость от типа распределения ошибок здесь выражается в виде симметризирующей функции, применяемой для вычисления $C_{\text{ме}}$.

Если же названные дисперсии отличаются мало, то необходимо производить вычисление $\bar{\xi}$ через $C_{\text{ме}}$ с исключением влияния дисперсии ошибок измерений.

При высоких требованиях к точности результатов необходим также учет рассматриваемых в следующем разделе ошибок другого рода.

Влияние формы пространственного распределения измеряемых величин. Решение задачи об «ураганных» пробах

Предположим вначале, что ошибки измерений пренебрежимо малы. Пусть r — точка в элементарном объеме $d\mathcal{V}_r$ пространства \mathcal{V} . Тогда, по определению,

$$Q = \int_{\mathcal{V}} \xi(r) \cdot d\mathcal{V}_r, \quad \bar{\xi} = \frac{Q}{\mathcal{V}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}} \xi(r) \cdot d\mathcal{V}_r. \quad (6)$$

Если $\Delta\mathcal{V}_i$ — пространство, представляемое i -й пробой в том смысле, в каком это было указано в начале главы, и $\xi_i = \xi(r_i)$ — концентрация в i -й точке опробования, то оценки Q^* и $\bar{\xi}^*$ величин Q и $\bar{\xi}$, вычисляемые по обычной методике, могут быть выражены так:

$$Q^* = \sum_{i=1}^n \xi(r_i) \cdot \Delta\mathcal{V}_i; \quad \bar{\xi}^* = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{i=1}^n \xi(r_i) \cdot \Delta\mathcal{V}_i. \quad (7)$$

Выражения (7) получаются из выражений (6) при аппроксимации подынтегральной функции $\xi(r)$ ступенчатой функцией. Согласно свойствам такой аппроксимации, это означает, что оценки Q^* и $\bar{\xi}^*$ стремятся с увеличением n соответственно к Q и $\bar{\xi}$ сверху или снизу, в зависимости от формы функции $\xi(r)$ и выбора точек r_i . Таким образом, при фиксированном числе проб и выбранной системе опробования названные оценки могут быть по-разному смещенными в зависимости от формы функции $\xi(r)$.

Характер смещения, согласно формулам (6) и (7), определяется знаком разности:

$$\Delta Q = \sum_{i=1}^n \xi(r_i) \cdot \Delta\mathcal{V}_i - \int_{\mathcal{V}} \xi(r) \cdot d\mathcal{V}_r. \quad (8)$$

Обозначим

$$\Delta Q_i = \xi(r_i) \cdot \Delta\mathcal{V}_i - \int_{\Delta\mathcal{V}_i} \xi(r) \cdot d\mathcal{V}_r. \quad (9)$$

Тогда, согласно (8), $\Delta Q = \sum_{i=1}^n \Delta Q_i$, т. е. ΔQ , в свою очередь, определяется как сумма разностей вида (9).

Разности вида (9) положительны, когда функция $\xi(r)$ выпукла, и отрицательны, когда она вогнута. При наличии же локальных (по сравнению с расстоянием между соседними точками опробования) максимумов и соответственно минимумов, величины $|\Delta Q_i|$ могут быть особенно велики, а следовательно, может быть большой и величина $|\Delta Q|$, определяющая смещение оценок Q^* и $\bar{\xi}^*$.

Приведем наглядное доказательство этого положения для одномерного пространства \mathcal{V} .

Сказанное легко обобщается на пространство \mathcal{V} любой размерности. Отсюда следует простое объяснение давно замеченных частых завышений средних концентраций и запасов цветных металлов, редких и рассеянных элементов при подсчетах по результатам опробования при разведке месторождений: эти элементы имеют локальные максимумы концентраций в виде малых скоплений минералов (по сравнению с расстояниями между точками опробования) и $\bar{\xi} \ll \xi_s$. Например, золото добывается при средних весовых концентрациях в руде порядка $10^{-3}\%$, в то время как $\xi_s = 100\%$ (самородное золото).

Упомянутые относительно высокие значения ξ_i из областей локальных максимумов соответствуют тем пробам, которые получили название «ураганных» по их влиянию на подсчеты запасов.

Для уменьшения искажений, связанных с этими пробами, по общепринятой методике производится их исключение из подсчета как «нетипичных». Иногда они заменяются в подсчете более низкими («типичными») значениями. Наиболее часто используемым признаком «нетипичности» является превышение величиной ξ_i некоторого условного уровня (например, уровня $\bar{\xi} + 3\sigma(\bar{\xi})$).

Сейчас вполне очевидно, что невозможно назвать никакой постоянной уровень, разделяющий «типичные» и «нетипичные» значения ξ_i . В принципе нельзя однотипным изъятием или заменой части сигналов поля ξ , без учета его формы, получить оценку $\bar{\xi}^*$, не смещенную относительно $\bar{\xi}$.

Выше мы говорили о приближенном представлении площади между кривой $\xi(r)$ и осью абсцисс совокупностью прямоугольников. Этот прием, называемый способом прямоугольников, широко применяется в геологии в связи с простотой и наглядностью. Может возникнуть вопрос: нельзя ли устранить упоминавшиеся выше недостатки в оценках запасов и средних концентраций μ использованием других способов, основанных на более сложных приемах интерполяции значений $\xi(r)$.

Следующим по сложности является хорошо известный способ трапеций. Он не дает существенного увеличения точности: как было указано, площади прямоугольников, используемых в предыдущем способе, равны площадям трапеций, строящимся по кривой $\xi(r)$, хотя это построение производится несколько иначе, чем в упомянутом способе.

Вопрос о влиянии «ураганных» проб не снимается и применением более сложных интерполяционных способов, таких как способ Симпсона (парабол) и др. Все эти способы основаны на представлении кривой $\xi(r)$ в виде функции, плавно меняющейся между точками с известными значениями ξ по детерминистически определенному закону. Локальность определенных аномалий, проявляющаяся лишь статистически, и наличие сигналов меньше шага опробования здесь не учитываются.

Существенное уточнение величин Q^* и $\bar{\xi}^*$ может быть произведено построением базисного распределения (тогда введенным выше значениям V будет соответствовать объем той части пространства \mathcal{V} , где $C > \xi$, а значению V_0 — объем всего пространства \mathcal{V}). Будучи монотонным, базисное распределение может быть построено при любых расстояниях между точками опробования практически всегда более точно, чем сама функция $\xi(r)$. Локальность экстремумов последней отображается на базисном распределении благодаря статистическому их проявлению, но без нарушения монотонности соответствующей ему кривой ξ_0 (как указывалось, базисное распределение может быть представлено через накопительную кривую).

Поскольку площадь, ограничиваемая кривой $\xi_0 = \xi_0(V)$ и осью V базисного распределения, равна, по его построению, величине Q , то

$$\bar{\xi} = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} \xi_0(V) \cdot dV \quad (10)$$

$$\text{и } Q = \overline{\xi} \cdot V^0 = \xi \cdot V_0.$$

Формула (10) может использоваться для оценивания $\overline{\xi}$ непосредственно, если вместо $\xi_6(V)$ подставить функцию $\xi_6^*(V)$, найденную с помощью алгоритмов аппроксимации, описанных в гл. I. Но и применение простейших приемов интегрирования, в том числе метода прямоугольников, здесь дает более точные результаты, чем при использовании формул (6), в связи с меньшей изменчивостью функции $\xi_6(V)$, чем функции $\xi(r)$. Всем «ураганным» пробам при этом соответствует только одно локальное повышение кривой ξ_6 с максимумом не внутри отрезка оси абсцисс, на котором строится аппроксимирующий прямоугольник, а на краю вогнутого участка кривой ξ_{6i} , в точке $V=0$. Как видно из предшествующих графических построений, это не может приводить к систематическому положительному смещению получаемых таким образом оценок Q^* и ξ^* .

Следовательно, при подобных построениях автоматически учитывается степень представительности «ураганных» проб с использованием содержащейся в них информации (хотя, разумеется, при большом числе таких проб точность отдельных получаемых оценок снижается при любых приемах из-за фактического увеличения дисперсии концентраций).

Пример. На рис. 26 показан построенный по стандартным требованиям график концентраций вольфрама, зафиксированных в результате отбора геохимических проб в квершлагае одного из месторождений. На рис. 27 показана соответствующая этому графику кривая базисного распределения. Роль кривой $\xi_6 = \xi_6(V)$

здесь играет кривая $C = C(N)$, где N — число проб, в которых зафиксирована концентрация не ниже C . Эта кривая представлена в двух вариантах: 1 — в двойном арифметическом масштабе и 2 — в полулогарифмическом (арифметическом по оси абсцисс и логарифмическом по оси ординат). В данном случае в полулогарифмическом масштабе облегчается интерполяция кривой между значениями C_i в связи с уменьшением ее кривизны, и кривая 1 строится антилогарифмированием кривой 2.

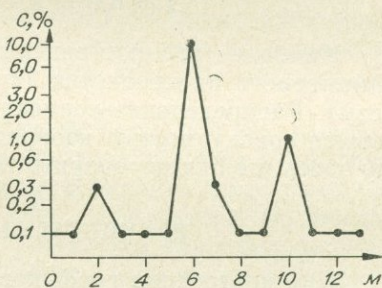


Рис. 26. График концентраций вольфрама в группе проб (местонахождение Дедова гора, Забайкалье, данные автора). Масштаб по оси ординат логарифмический.

Для оценки концентраций использовался спектральный анализ. Шкала фиксируемых значений указана числами на оси ординат рис. 26. Это шкала с примерно постоянной кратностью, т. е. границы интервалов дискретности записей здесь — средние геометрические значения из соседних чисел.

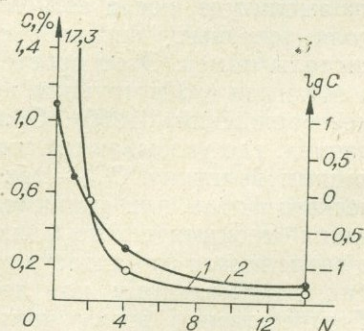


Рис. 27. Базисное распределение по результатам измерения концентраций вольфрама в группе проб.

Исходные данные на рис. 26.
1 — кривая концентраций, 2 — кривая логарифмов концентраций.

Эти значения и принимались в качестве $\{\xi_{6i}\}$ при построении кривой базисного распределения.

Прямой подсчет средней концентрации по формуле (7) дает $\bar{C}^* = 0,9\%$; подсчет же через базисное распределение по формуле (10) дает оценку $\bar{C}^* = 0,526\%$, т. е. нелинейность пространственного распределения концентраций приводит в данном случае к завышению \bar{C} в 1,7 раза. Это наглядно иллюстрирует и

объясняет подмеченное рядом исследователей (Богацкий, 1963, и др.) частое существенное завышение оценок средних концентраций и запасов месторождений редких и рассеянных элементов.

Если желательно уменьшить влияние на оценки Q^* и $\bar{\xi}^*$ шумов, в частности ошибок измерений, то предварительно по результатам измерений можно построить статистическое распределение наблюдаемых значений C и исключить из него это влияние. Как указывалось, при известной симметризирующей функции шумов такая операция сравнительно проста. Получив в результате функцию, аппроксимирующую интегральную кривую распределения значений ξ , можно построить по ней функцию $\bar{\xi}_0^*$ так, как это было указано для ее построения по кумулятивной кривой.

Базисное распределение может быть использовано для уточнения не только величины Q и среднего значения $\bar{\xi}$, но и некоторых других параметров, в частности дисперсии значений ξ :

$$D(\xi) = \frac{1}{V_0} \int_{V_0} (\xi_0(V) - \bar{\xi}) \cdot dV.$$

(Автокорреляционная же функция и связанные с ней характеристики явно неодинаковы у функций $\xi(r)$ и $\xi_0(V)$).

В качестве ξ и C в выведенные формулы могут быть подставлены, разумеется, не только концентрации, но и любые другие изучаемые величины.

§ 4. ИЗОБРАЖЕНИЕ ПОЛЕЙ КОНЦЕНТРАЦИЙ

Наиболее распространены изображения геохимических полей для одномерного пространства (графики) и для двумерного (карты и разрезы). Распределение концентраций в трехмерном пространстве отображается совокупностью изображений поля в двумерных сечениях. Поэтому здесь мы будем говорить только о графиках и картах.

ПРИНЦИПЫ ВЫДЕЛЕНИЯ ПОЛЕЗНЫХ СИГНАЛОВ

При построении графиков и карт геохимических полей встает задача отображения именно тех составляющих полей, которые обусловлены изучаемыми процессами. Поэтому в зависимости от преследуемых целей, согласно § 1, в определенных точках изображения поля должны указываться различные концентрации.

Довольно распространенным является принцип выделения сигналов по амплитуде, когда есть основания полагать, что достаточно большая доля полезных сигналов существенно превышает по интенсивности сигналы помех. Этот простейший принцип сейчас широко используется в геохимии («Инструкция по геохимическим методам поисков рудных месторождений», 1965). Обычно строятся карты «аномальных концентраций», где указываются только области со значениями поля, превышающими величину $C_{ам}$, — так называемый «уровень колебаний геохимического фона», или «минимально-аномальное значение». В качестве значений «геохимического фона» C_{ϕ} принимается значение \bar{C} или, чаще, \bar{C} , в зависимости от близости распределения оценок концентраций C в пробах к нормальному или логнормальному законам (Сафронов, 1967). Соответственно этому принимается $C_{ам} = C_{\phi} + k \cdot \sigma(C)$ или $C_{ам} = C_{\phi} \times \chi_{ant}(k \cdot \sigma(\lg C))$, где k — число, отражающее ширину доверительного интервала (обычно принимается равным от 1 до 3). Вычисления $C_{ам}$ рекомендуется производить отдельно для каждой части территории исследований, которая представляется геологически однородной, с исключением «заведомо аномальных» значений C .

Такой способ, вероятно, можно назвать первым приближением к фильтрации помех. Согласно § 3, мы знаем, что определенная указанным образом величина C_Φ является, вообще говоря, смещенной и сама по себе может не характеризовать какую-либо природную величину (как было показано, \bar{C} уменьшается при постоянном Q с увеличением $D(\lg C)$). Заметим также, что фон не может быть определен однозначно для всех случаев: он различен даже в одной точке в зависимости от того, что мы выделяем — региональную аномалию или локальную на ее фоне (рис. 28). На фоне локальной аномалии могут быть еще более локальные и т. д. Величина $C_{ам}$, будучи зависимой от значений C_Φ , изменится вместе с ними и, кроме того, зависит дополнительно от ошибок измерений (входящих в σ) и субъективно подбираемой величины k . Нельзя не заметить и субъективности исключения «заведомо аномальных» значений, предположительно не входящих в пределы колебаний фона, но устанавливаемых до его оценки. Неблагоприятно также устранение из рассмотрения участков поля со значениями $C < C_{ам}$, где могут быть важные сигналы.

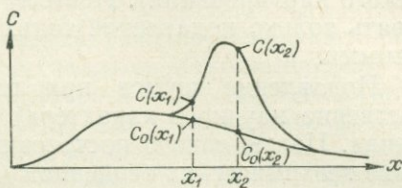


Рис. 28. К определению понятия фона и аномальной концентрации.

$C(x_1)$ и $C(x_2)$ — концентрации в пробах, отобранных соответственно в точках x_1 и x_2 ; $C_0(x_1)$ и $C_0(x_2)$ — концентрации, которые наблюдались бы при отсутствии наложения локальной аномалии, они же — аномальные концентрации для региональной аномалии (фон которой принят всюду нулевым) и фоновые — для локальной аномалии; $C(x_1) - C_0(x_1)$ и $C(x_2) - C_0(x_2)$ — аномальные концентрации для локальной аномалии.

Наконец, выделенные значения $C \geq C_{ам}$ являются лишь наблюдаемыми оценками концентраций, полностью включающими погрешности. Между тем, как было показано, можно получить более близкие к действительности представления.

Распространенная практика расчета сети, необходимой для выявления и оценки аномалий, предполагает, что искомые объекты и соответствующие им сигналы имеют резкие границы и определенные размеры (Савинский, 1964; Семенова, 1966; и др.). При этом расчете не учитывается влияние помех и обычно предполагается, что для обнаружения полезного сигнала достаточно попадания в него одной точки опробования или другого фиксированного числа точек. Как следует из изложенного выше, в это представление должна быть внесена соответствующая поправка: для достижения нужной надежности выделения полезного сигнала указанное число должно быть тем больше, чем больше величина $D(\Delta u)$.

Разумеется, при этом не исключается рассмотрение и не обработанных по новым методам первичных материалов, использование прежней методики там, где она заведомо эффективна. Иногда нужны и чисто интуитивные заключения: большой опыт и подсознание исследователя могут подсказать решение в некоторых случаях, не учтенных описываемыми математическими построениями.

Математическая фильтрация (отделение, подавление) шумов эквивалентна аппроксимации (приближенному выделению) полезных сигналов. Преимущественное применение первого из этих терминов при картировании является лишь традиционным. Поэтому здесь применимы общие положения, описанные в § 4 гл. I данной работы и в упоминавшейся там литературе (Колмогоров, 1941; Wiener, 1949; и др.). Удобны для использования книги (Вайнштейн, Зубаков, 1960; Бендат, 1965; Хемминг, 1968); новые данные о математической фильтрации содержатся также в литературе по кибернетике (Резников, 1968; и др.). Теория фильтрации шумов широко применяется сейчас и в геофизике.

Наиболее распространена частотная фильтрация. Она выражается в преимущественном подавлении (сглаживании) сигналов заданной ча-

стоты. Подавляя полезные и более высокочастотные сигналы, можно оценить низкочастотный фон, который затем может быть вычтен из изучаемого поля.

При построении геохимических карт особенно важно подавление относительно высокочастотных шумов, так как низкочастотные сигналы могут быть сравнительно полно использованы (например, для геологического картирования). Поэтому далее в этой главе мы будем рассматривать только подавление таких шумов, считая остальные сигналы полезными.

Подавление шумов при геохимических исследованиях (преимущественно научного характера) началось с построения поверхностей тренда. Целью такого построения являлось несколько отвлеченное изучение геохимических тенденций (Krumbein, 1956; Miller, 1956; и др.). Но в последнее время и у нас, и за рубежом стали замечать, что этот метод помогает при изучении рудных полей (Nackowski, Mardirosian and Botbol, 1967; Четвериков, 1968; и др.).

Для отображения тренда первоначально использовались параболические кривые и поверхности, обычно порядка 1÷3, строящиеся методом наименьших квадратов для изучаемой территории в целом. Построение кривых и поверхностей более высокого порядка технически затруднительно. Между тем, такими линиями и поверхностями невозможно отобразить с нужной детальностью даже весьма простые геохимические поля. В частности, как нетрудно показать, максимальное число экстремумов одного знака (например, отображений максимумов концентраций) на параболе порядка L с одномерным аргументом не может быть больше числа $(L+1)/2$.

Выходом из такого положения является использование метода скользящего окна: по изучаемому пространству передвигается воображаемое «окно», имеющее определенные размеры (в одномерном пространстве — длину, в двумерном — длину и ширину, и т. д.). При его остановках вычисляются выбранные статистические параметры для попадающих в него совокупностей точек изучаемого поля. Полученные значения приписываются точке, в которой находится центр окна. Положения окна при разных остановках могут перекрываться. В результате может быть получено новое изображение поля, соответствующее вычисленной характеристике. В частности, по наблюдаемым концентрациям могут быть вычислены усредненные концентрации, дисперсии концентраций или их функций (например, логарифмов концентраций), коэффициент корреляции и др. Полученное изображение поля может рассматриваться как исходное для следующей обработки с помощью того же или иного скользящего окна.

Скользящее окно уже давно применялось для вычисления усредненных значений измеряемых величин в других науках, в частности в геофизике, где известны примеры его применения, когда месторождения обнаруживались только после сглаживания наблюдаемых сигналов (Сегалович, 1965; и др.). В геохимии усреднение концентраций по трем смежным точкам отбора проб рекомендовал А. П. Соловов (1959) для сглаживания графиков концентраций μ в аллювиальных потоках. При изучении руд сглаживание концентраций производили П. Л. Каллистов, Д. А. Зенков и др. (Каллистов, 1956; и др.).

Расширение области применения скользящего окна и практическое его использование при производственных геохимических исследованиях тормозились нерешенностью вопроса об оптимальных размерах окна и кратности усреднения. Тем более ограниченным, не выходящим за рамки отдельных экспериментов оказалось применение других, более сложных методов, в том числе оптимальной фильтрации, которая, как упоминалось, требует знания спектров полезных сигналов и шумов (Wiener, 1949; Хемминг, 1968; Демашев, Коршунов, 1967; и др.).

Поэтому в геохимии, как и в других областях геологии, превалировал интуитивный выбор параметров фильтров по наглядным оценкам получаемых результатов уже после их получения, рекомендовавшийся и в литературе (Миллер, Кан, 1965; «Вопросы математической геологии», 1968; и др.).

В гл. I были описаны алгоритмы ранговой аппроксимации, с помощью которых можно преодолеть указанные трудности при различных методах фильтрации.

В данном параграфе мы ограничиваемся рассмотрением методических вопросов изображения полезной составляющей геохимических полей без исследования их физической сущности на основе алгоритма аппроксимации второго ранга (см. § 4, гл. I) для относительно простых случаев, легкодоступных для практического использования.

Предварительно отметим еще одно общее положение, недоучет которого может привести к неправильному пониманию дальнейшего изложения.

Нередко возникают споры о необходимости отдельной математической обработки результатов геохимической съемки тех частей исследуемой территории, которые разделены геологическими границами, и о трудностях такого разделения в связи с возникающими при этом техническими осложнениями и условностью таких границ.

Подобные споры обычно связаны с нечетким представлением о решаемых задачах. Действительно, при решении прямой задачи, когда требуется узнать геохимическое поле уже известных геологических образований, специальное отделение относящихся к ним проб может быть необходимо и сравнительно несложно. Если же решается обратная задача, т. е. по наблюдаемому полю нужно найти отображаемые им геологические тела и границы, то решение о положении таких границ может быть вынесено только после обработки данных.

Положения, рассматриваемые в данном параграфе, посвящены изображению геохимических полей с целью решения обратной задачи.

Подавление шумов усреднением

Основы метода. Для усреднения могут применяться скользящие окна любых форм, но для ряда целей, в том числе для введения описываемых ниже поправок, в одно-, дву- и трехмерном пространствах оказались наиболее удобными окна в виде соответственно отрезка, прямоугольника и прямоугольного параллелепипеда.

Согласно теории метода наименьших квадратов, средняя величина поля по такому окну равна значению поля в центре окна на поверхности тренда, выражаемой параболой нулевого или первого порядка (эта парабола есть линейная функция, а значение такой функции в середине любого отрезка равно средней ее величине на всем отрезке). Поэтому построения с помощью названного окна могут дать достаточно детальное изображение изучаемого поля, если размеры окна не слишком велики по сравнению с расстояниями, на которых изменения этого поля можно считать линейными.

Соответственно сказанному выше средние значения изучаемого поля вычисляются по скользящему окну при «остановках» и относятся к точкам пространства, где при этом оказывается его центр. Усредненное поле строится интерполяцией между этими точками. Вполне понятно поэтому, что расстояние между положениями центра окна при остановках (шаг окна) невыгодно делать большим по сравнению со средним расстоянием между точками опробования, так как могут быть потеряны существенные детали в изображении поля. С другой стороны, шаг окна нецелесообразно делать меньше среднего расстояния между точками опробования в соответствующем направлении: иначе пере-

мещение окна не всегда будет приводить к смене попадающих в него точек, и изображение усредненного поля примет ступенчатый вид, в принципе отличающийся от действительного. При равномерной сети опробования положение центра окна (при остановках) должно совпадать с точками опробования или находиться посередине между ними. При этом размеры окна определяются суммой пространств, представляемых попадающими в него точками опробования.

Во избежание ошибок (уже наблюдавшихся) поясним последнюю фразу: если, например, окно захватывает три профиля, находящихся на расстоянии 100 м друг от друга, то каждый профиль представляет полосу пространства шириной 100 м. Тогда размер окна в направлении, перпендикулярном профилям, составляет $3 \times 100 = 300$ м, т. е. этот размер больше расстояния между крайними попадающими в окно профилями, составляющего 200 м. Ошибка, нередко допускаемая в подобных случаях, приводит к существенным искажениям поправок на усреднение.

По достигаемому эффекту численное усреднение концентраций в принципе аналогично увеличению размеров проб, производимому для улучшения их представительности. В то же время при численном усреднении специфическая информация, заключенная в малых пробах, не теряется безвозвратно, так как исходные данные сохраняются и могут быть использованы в различных комбинациях произвольное число раз. Ошибки же измерений здесь подавляются сильнее, соответственно числу объединяемых результатов.

В простейшем случае оценка среднего значения поля по окну вычисляется по формуле

$$\bar{C} = \frac{\sum_{i=1}^m C_i \cdot s_i}{\sum_{i=1}^m s_i}, \quad (1)$$

где C_i — оценка концентрации в i -й пробе, точка отбора которой попадает в окно; s_i — представляемое ею пространство (длина в одномерном случае, площадь — в двумерном, объем — в трехмерном); m — число точек опробования, попавших в окно. Как мы оговаривались, при теоретических выкладках можно принять $s_i = \text{const}(i)$. Тогда вместо (1) имеем:

$$\bar{C} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m C_i. \quad (2)$$

Если ошибки измерений относительно велики по сравнению с колебаниями поля внутри окна, то, согласно § 3, более точный результат получается, если использовать вместо величины C функцию, симметризирующую ошибки. В частности, при логнормальном распределении ошибок, согласно выводу формулы (5, § 3), лучше вычислять не выражение (2), а

$$\bar{C} = \text{ant} \left(\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \lg C_i \right). \quad (3)$$

Следующим приближением является более точный учет смещений. Например, при логнормальном распределении величин C и ошибок это можно сделать вычислением по окну оценки, соответствующей формуле (3, § 3). Более общим является вычисление оценки величины ξ по базисному распределению оценок ξ (с исключением закона распределения ошибок значений C , если эти ошибки существенны по сравнению с колебаниями значений изучаемого поля в окне).

К сожалению, учет погрешностей измерений при широких производственных геохимических работах сейчас затруднен отсутствием не-

обходимых данных: невыполнение рандомизации проб перед вещественным анализом приводит к изменению погрешностей в пределах участка, по которому строится карта. В таком случае необходимы изображение и использование переменного поля погрешностей, но это затруднено тем, что повторный (контрольный) анализ делается, как правило, неравномерно по исследуемому участку.

Результаты кратного усреднения могут быть получены в результате одной операции. Рассмотрим ее для случая, когда вычисляется среднее арифметическое некоторой величины Z (которая может быть равна C , или $\lg C$, или другой величине, соответственно используемой функции). Будем полагать, что известны значения Z для точек равномерного отбора проб по профилю. К этому случаю без особого труда сводятся все остальные: неравномерная сеть сводится к равномерной предварительным усреднением при постоянном шаге окна. Усреднение же по площади (или объему) можно представить как композицию операций усреднения по двум (или трем) взаимно перпендикулярным системам профилей: результаты усреднения по профилям, параллельным одной координатной оси, рассматриваются как исходные для усреднения по профилям, проходящим через те же точки параллельно другой координатной оси.

Для удобства вывода соответствующей формулы введем систему индексов, при которой они рассматриваются как аргументы с разверткой их в строку: вместо Z_{i_n} будем писать $Z[i[n]]$ и т. п. (аналогично обозначениям в АЛГОЛ-60).

Пусть $m[j]$ — число точек отбора проб, попадающих в окно при j -м усреднении; $j=0, 1, 2, \dots, n$; $m[0]=1$ (т. е. нулевое усреднение оставляет неизменными исходные значения); $m[n+1]$ — общее число точек отбора проб в исследуемом пространстве, где производится усреднение; $i[j-1]=1, 2, 3, \dots, m[j]$ — номер точки, к которой относится результат $(j-1)$ -го усреднения, в группе, объединяемой для вычисления одного среднего значения при j -м усреднении (т. е. $i[0]=i$ — номер точки отбора пробы в группе, попадающей в окно при первом усреднении; $i[1]$ — номер точки с результатом первого усреднения в группе, попадающей в окно при втором усреднении, и т. д.); $i[n]=1, 2, 3, \dots, m[n+1]$ — номера точек, в которых нужно получить результаты n -го усреднения (в линейном случае — это порядковые номера точек с окончательными результатами на всем профиле исследований: эти точки можно представить как попадающие в окно, равное по размерам исследуемому пространству); $\bar{Z}^{(j)}$ — результат j -го усреднения.

Шаг окна при всех усреднениях, кроме последнего, примем равным расстоянию между точками исходных значений; шаг окна последнего усреднения определяется расстоянием между точками, для которых фактически производятся вычисления. Каждой точке на профиле присвоим номер, определяющий ее положение по отношению к точке, в которой в данный момент требуется получить $\bar{Z}^{(n)}$: считая индексы возрастающими в одном направлении, будем полагать, что точка с номером $i[n]+\alpha$ отстоит правее точки с номером $i[n]$ на расстояние $\alpha\lambda$, где λ — расстояние между точками отбора проб с номерами i и $i+1$ (одинаковое при всех возможных i).

При любом усреднении значение α либо равно нулю, либо кратно величине $1/2$, так как средние значения относятся либо к точкам отбора проб, либо находятся посередине между ними. Тогда результаты n -го усреднения получаются из результатов $(n-1)$ -го усреднения следующим образом:

$$\bar{Z}^{(n)}[i[n]] = \frac{1}{m[n]} \sum_{i[n-1]=1}^{m[n]} \bar{Z}^{(n-1)} \left[i[n] - \frac{m[n]-1}{2} + i[n-1] - 1 \right] =$$

$$= \frac{1}{m[n]} \sum_{i[n-1]=1}^{m[n]} \bar{Z}^{(n-1)} \left[i[n] + i[n-1] - \frac{m[n]+1}{2} \right].$$

Выражая аналогично $\bar{Z}^{(n-1)}$ через $\bar{Z}^{(n-2)}$, $\bar{Z}^{(n-2)}$ через $\bar{Z}^{(n-3)}$, ..., $\bar{Z}^{(1)}$ через $\bar{Z}^{(0)} = Z$, получаем:

$$\begin{aligned} \bar{Z}^{(n)} [i[n]] &= \frac{1}{m[n]} \sum_{i[n-1]=1}^{m[n]} \frac{1}{m[n-1]} \sum_{i[n-2]=1}^{m[n-1]} \dots \\ &\dots \frac{1}{m[1]} \sum_{i[0]=1}^{m[1]} Z \left[\sum_{j=0}^n i[j] - \sum_{j=1}^n \frac{m[j]+1}{2} \right] = \\ &= \frac{1}{\prod_{j=1}^n m[j]} \sum_{i[n-1]=1}^{m[n]} \sum_{i[n-2]=1}^{m[n-1]} \dots \sum_{i[0]=1}^{m[1]} Z \left[\sum_{j=0}^n i[j] - \sum_{j=1}^n \frac{m[j]+1}{2} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

Или, короче:

$$\bar{Z}^{(n)} [i[n]] = \frac{1}{\prod_{j=1}^n m[j]} \cdot \left(\prod_{j=1}^n \sum_{i[j-1]=1}^{m[j]} \right) Z \left[\sum_{j=0}^n i[j] - \sum_{j=1}^n \frac{m[j]+1}{2} \right]. \quad (5)$$

Для построения карт нужно знать взаимоотношение точек отбора проб и точек, к которым относятся значения $\bar{Z}^{(n)}$: точки с полученными при усреднении значениями $\bar{Z}^{(n)}$ совпадают с точками, где заданы исходные значения Z , если число $v = \sum_{j=1}^n (m[j] + 1) = n + \sum_{j=1}^n m[j]$ четное, и находится между ними, если оно нечетное.

Можно использовать аналогично четность или нечетность числа

$$v' = n + \sum_{j=1}^n a[j], \text{ где } a[j] = \begin{cases} 0 & \text{при четном } m[j], \\ 1 & \text{при нечетном } m[j]. \end{cases}$$

В частности, если $n=1$, $m[1]=m$, то, согласно выражению (5), получаем очевидную формулу:

$$\bar{Z}^{(1)} [i[1]] = \frac{1}{m} \sum_{i[0]=1}^m Z \left[i[1] + i[0] - \frac{m+1}{2} \right],$$

отличающуюся от формулы (2) только обозначением индекса, который здесь указывает положение исходных точек относительно той, которой должно быть приписано среднее по окну значение. При этом v' четно при нечетном m и нечетно при четном m . При $n=2$, $m[1]=m[2]=m$, т. е. при двукратном усреднении с неизменным окном, согласно формуле (5):

$$\bar{Z}^{(2)} [i[2]] = \frac{1}{m^2} \cdot \sum_{i[1]=1}^m \sum_{i[0]=1}^m Z [i[2] + i[1] + i[0] - m - 1] \quad (6)$$

Выражение $\sum_{j=0}^n i[j] - \sum_{j=1}^n \frac{m[j]+1}{2}$ может принимать одинаковые значения при различных $i[j]$ для фиксированных j и заданного числа $i[n]$. Нетрудно видеть, что в связи с этим значения $Z[i]$ в точках, близких к той, для которой вычисляется $\bar{Z}^{(n)}$, повторяются чаще в общей сумме выражения (5), чем значения в более далеких точках. Это увеличивает статистический вес близких точек в окончательном результате по сравнению с далекими и приводит к меньшему искажению полезного сигнала.

ла усреднением, чем при одинаковом статистическом весе всех точек.

Полученные выражения можно преобразовать к виду, более удобному для вычислений. В частности, при $n=2$, $m[1]=m[2]=m$ выражение $i[2]+i[1]+i[0]-m-1$ принимает одинаковые значения для заданной точки $i[2]$ при различных $i[1]$ и $i[0]$ (принимающих значения в пределах, указанных для сумм), если сохраняется величина $i[1]+i[0]$.

$$i[0]+i[1]=\begin{cases} 2 & \text{при одном возможном сочетании: } i[0]=1 \wedge i[1]=1; \\ 3 & \text{при двух сочетаниях: } i[0]=1 \wedge i[1]=2; i[0]=2 \wedge i[1]=1 \\ 4 & \text{при трех сочетаниях: } i[0]=1 \wedge i[1]=3; i[0]=2 \wedge i[1]=2; \\ & i[0]=3 \wedge i[1]=1; \\ \vdots & \\ 2 & \text{при одном возможном сочетании: } i[0]=m \wedge i[1]=m. \end{cases}$$

В результате формула (6) преобразуется к виду:

$$\bar{Z}^{(2)}[i[2]] = \frac{1}{m^2} (Z[i[2]-m+1] + 2Z[i[2]-m+2] + \\ + 3Z[i[2]-m+3] + \dots + mZ[i[2]] + \dots + 3Z[i[2]+m-3] + \\ + 2Z[i[2]+m-2] + Z[i[2]+m-1]).$$

Поскольку здесь участвует только одна нумерация точек, то можно принять для простоты i вместо $i[2]$:

$$\bar{Z}^{(2)}[i] = \frac{1}{m^2} (Z[i-m+1] + 2Z[i-m+2] + 3Z[i-m+3] + \dots + \\ + mZ[i] + \dots + 3Z[i+m-3] + 2Z[i+m-2] + Z[i+m-1]). \quad (7)$$

Аналогичным образом из общей формулы (5) можно получить и другие частные выражения.

Когда центр скользящего окна находится на ограниченном расстоянии от крайней исходной точки, то некоторые значения Z , входящие в формулу (5), могут быть не определены. Тогда число слагаемых в ней уменьшается. В соответствии с этим должен уменьшаться и делитель, стоящий перед суммой: он должен быть всегда равен сумме коэффициентов при суммируемых значениях Z . Например, при двукратном усреднении с окном, включающем по две исходные точки,

$$\bar{Z}^{(2)}[i] = \frac{1}{4} (Z[i-1] + 2Z[i] + Z[i+1]).$$

Когда $i=0$, то получаем:

$$\bar{Z}^{(2)}[0] = \frac{1}{3} (2Z[0] + Z[0+1]).$$

Формулы (5—7) понадобятся далее главным образом для теоретического обоснования оптимальных размеров скользящего окна. При вычислениях же обычно проще производить кратное усреднение.

Во избежание сужения области получаемых результатов в число точек, с которыми совмещается центр окна при вычислении среднего, должны включаться на равных основаниях как внутренние, так и крайние точки опробованного пространства.

При положениях центра окна, близких к границе и совпадающих с нею, когда часть окна оказывается вне опробованного пространства, в окно попадает в среднем меньше точек отбора проб, чем в остальных случаях. Это означает некоторое снижение точности оценки среднего значения поля для таких точек, но на него приходится неизбежно идти: исключение из рассмотрения областей с такими точками приводит к потере информации.

Выбор размеров окна и кратности усреднения. Пусть Z' — какая-то составляющая изучаемого суммарного поля величины Z . Тогда в усредненном поле эта составляющая представлена величиной

$$\bar{Z}' = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m Z'_i, \quad (8)$$

где Z'_i — значение Z' в i -й точке, попадающей в окно при нахождении его центра в той точке, для которой определяется \bar{Z}' . Применяя к выражению (8) оператор дисперсии, получаем:

$$D(\bar{Z}') = \frac{1}{m^2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m K(Z'_i, Z'_j). \quad (9)$$

Для локальных высокочастотных шумовых сигналов с радиусом корреляции меньше расстояния между соседними точками отбора проб имеем по определению: $K(Z'_i, Z'_j) = 0$ при всех $i \neq j$ и $K(Z'_i, Z'_j) = D(Z')$ при $i = j$, т. е. тогда

$$D(\bar{Z}') = \frac{1}{m} D(Z'). \quad (10)$$

Если же радиус автокорреляции больше расстояния между соседними пробями, то $K(Z'_i, Z'_j) \neq 0$ хотя бы для некоторых $i \neq j$. Для гармонических сигналов определенных форм и размеров с длиной «волны» меньше соответствующих размеров скользящего окна, возможны отрицательные значения $K(Z'_i, Z'_j)$ при $i \neq j$. Тогда величина $D(\bar{Z}')$ может быть меньше, чем следует из формулы (10). В среднем же с увеличением пространственных размеров сигналов увеличивается положительная корреляция между соответствующими им значениями Z'_i, Z'_j . Поэтому в пределе, при линейном изменении этой составляющей поля внутри скользящего окна, когда $K(Z'_i, Z'_j) = D(\bar{Z}')$ для всех i, j , согласно формуле (9), получаем наибольшее возможное значение для дисперсии средних:

$$D(\bar{Z}') = D(Z'). \quad (11)$$

Таким образом, высокочастотные сигналы, некоррелированные в точках отбора проб (и относимые обычно к случайным шумам), подавляются усреднением в наибольшей мере: согласно выражению (10), представляющая их составляющая в усредненных данных имеет дисперсию в m раз меньшую, чем в исходных данных. Сигналы же, меняющиеся в пределах окна приблизительно линейно, не подавляются усреднением, поскольку составляющая, представляющая их в усредненных данных, имеет, согласно выражению (11), ту же дисперсию, что и до усреднения (последний вывод следует и непосредственно из очевидного равенства значения линейной функции в середине окна и ее среднего арифметического значения по окну). Подавление остальных составляющих является промежуточным между случаями, выражаемыми равенствами (10) и (11).

Пусть Z' и Z'' — две составляющие поля Z разной частоты. Подавление этих составляющих усреднением выражается соответственно расстояниями $D(Z') - D(\bar{Z}')$ и $D(Z'') - D(\bar{Z}'')$. Рассмотрим отношение

$$I = \frac{D(Z') - D(\bar{Z}')}{D(Z'') - D(\bar{Z}'')} = \frac{D(Z') - \frac{1}{m^2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m K(Z'_i, Z'_j)}{D(Z'') - \frac{1}{m^2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m K(Z''_i, Z''_j)}. \quad (12)$$

Предположим, что Z' — более высокочастотная составляющая, чем Z'' . Тогда для любого возможного значения m

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m K(Z'_i, Z'_j) < \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m K(Z''_i, Z''_j),$$

так как чем выше частота случайных сигналов, тем меньше в среднем корреляция между соответствующими им значениями поля в точках, разделенных фиксированным расстоянием. Уменьшение m увеличивает и числитель, и знаменатель выражения (12), отражая уменьшение подавления обеих рассматриваемых составляющих поля Z , но, в силу последнего неравенства, увеличение числителя при этом больше увеличения знаменателя, т. е. I растет. Это означает, что с уменьшением размеров окна, когда подавление любых сигналов также уменьшается, отношение подавления более высокочастотной составляющей к подавлению низкочастотной растет. Следовательно, проводя при заданных размерах окна кратное усреднение до тех пор, пока сигналы определенной частоты не будут подавлены в нужной мере, мы тем меньше подавим любые более низкочастотные сигналы, чем меньше эти размеры. Следовательно, для минимизации подавления полезных сигналов при заданном подавлении любых более высокочастотных помех целесообразно использовать минимально возможное окно, при котором еще возможно усреднение (компенсируя уменьшение окна необходимым увеличением кратности усреднения). Оптимальная кратность усреднения при этом определяется алгоритмом аппроксимации второго ранга.

В частности, при одномерном пространстве опробования минимальным является окно, для которого $m=2$. Тогда простейшее непосредственное сравнение усредненных и исходных значений поля, используемое в алгоритмах аппроксимации, возможно только при четных n , так как при нечетных n центр окна останавливается между исходными точками. (Но тогда может быть использован описанный в § 4 гл. I измененный критерий, не требующий сопоставления значений $\varphi^*(r_h)$ с $f(r_h)$).

При $m=3$ центр окна всегда останавливается в исходных точках, но однократное применение такого окна больше подавляет полезные сигналы, чем двукратное применение окна с $m=2$. Действительно, согласно формулам (5—7), в первом и во втором случаях для вычисления результативного усредненного значения используются значения Z в трех исходных точках, но при однократном усреднении с $m=3$ они входят в \bar{Z} с равным весом, в то время как при двукратном усреднении с $m=2$ удаленные точки имеют меньший статистический вес. Тем более далекими от оптимальных являются окна с $m>3$.

Таким образом, при одномерном пространстве опробования (при построении графика концентраций по равномерно опробованному профилю) оптимальным для фильтрации шумов усреднением является окно с $m=2$.

При площадной съемке или трехмерном опробовании (по совокупности подземных горных выработок) окно может быть двумерным, площадным, или трехмерным, объемным. Тогда соответственно увеличивается и m .

Иногда линии опробования расположены на слишком больших расстояниях. Тогда, несмотря на двумерность или трехмерность опробуемого пространства, применяемое скользящее окно может быть одномерным, с усреднением только вдоль таких линий, во избежание избыточного усреднения на больших расстояниях между ними. По аналогичной причине при трехмерном пространстве опробования может быть произведено усреднение двумерным окном по определенным раз-

Для упрощения, ускорения и удешевления вычислений на практике приходится пользоваться скользящими окнами с размерами, превышающими минимально возможные, так как увеличение размеров окна приводит к уменьшению необходимой кратности усреднения (хотя это сопровождается некоторым ухудшением результатов).

Увеличивать окно приходится также при чувствительности вещественного анализа, недостаточной для фиксации концентраций в каждой пробе. Тогда при некоторых положениях относительно малого окна в него может не попасть ни одной точки с фиксированной концентрацией. В таких случаях размеры окна увеличивают так, чтобы при каждой остановке в него попадало столько точек с фиксированными концентрациями, сколько необходимо для вычисления S^* по накопительной кривой. Заметим, что изъятие из рассмотрения тех точек, в которых не зафиксированы концентрации, означает заведомо потерю имеющейся информации о малости этих концентраций (в описанном же способе они учитываются при построении накопительной кривой как число проб ниже определенной концентрации).

Подобные осложнения возникают при вычислениях любых параметров. Преодоление этих осложнений единообразно и поэтому далее, до § 6, мы на них не останавливаемся.

Размеры окна могут быть различными по разным координатным осям, согласно изложенным выше соображениям об автокорреляции. В частности, для выявления заведомо протяженных объектов (например, региональных тектонических разломов) соответственно увеличивается размер окна в направлении, параллельном предполагаемому простиранию этих объектов.

Если по данным крупномасштабных работ производится построение обзорной геохимической карты, то изображение на ней всех выявленных ореолов рудных тел невозможно. Полезными сигналами здесь являются аномалии, изображенные в соответствующем масштабе (они могут быть групповыми, отражая тенденции распределения вещества в целом в пределах рудных полей, провинций и т. д.). По существующим требованиям, на геологических картах должны изображаться объекты, имеющие размеры 1 см или более в масштабе карты. Соответственно этому, в таких случаях и скользящее окно может быть выбрано с ребром 1 см в том же масштабе, хотя при таких построениях в него может попадать количество проб, значительно превышающее минимально возможное.

Согласно алгоритму аппроксимации второго ранга (см. § 4, гл. I), усреднение повторяется до тех пор, пока не перейдет через нуль выбранный критерий аппроксимации. Затем из результатов последнего и предпоследнего усреднений выбираются те, для которых ближе к нулю значение этого критерия.

Пример. На рис. 29 показан план концентраций свинца в районе группы полиметаллических месторождений и рудопроявлений. При построении этого плана использовались данные отбора геохимических проб из элювия — делювия по сети, соответствующей схеме масштаба 1 : 50 000. Полученные результаты оказались неплохими для съемки такого масштаба: месторождения находятся в области расположения группы максимумов концентраций. При существующей системе детализационных работ эти месторождения попали бы на участок детальных исследований, задаваемый по таким данным. Этот участок примерно (в зависимости от обычных вариаций для разных исследователей) соответствует контуру I.

После выделения полезных сигналов усреднением по описанной выше методике максимумы значений S^* стали практически совпадать с месторождениями (рис. 30). В таком случае детализационные работы достаточно было бы провести лишь на нескольких малых участках,

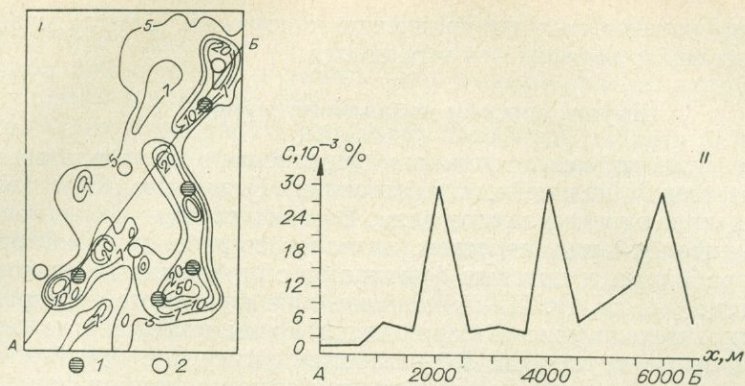


Рис. 29. Изображение поля концентрации свинца на одном из участков геохимической съемки по данным опробования элювия — делювия по сети $\sim 500 \times 100$ м (первичные материалы Б. М. Васильева, составитель В. А. Найгебауэр).

I — план изоконцентрат C ; II — график C по линии AB. 1 — полиметаллические месторождения; 2 — рудопроявления. Средняя абсолютная погрешность логарифмов концентрации $|\Delta| = 0,120$.

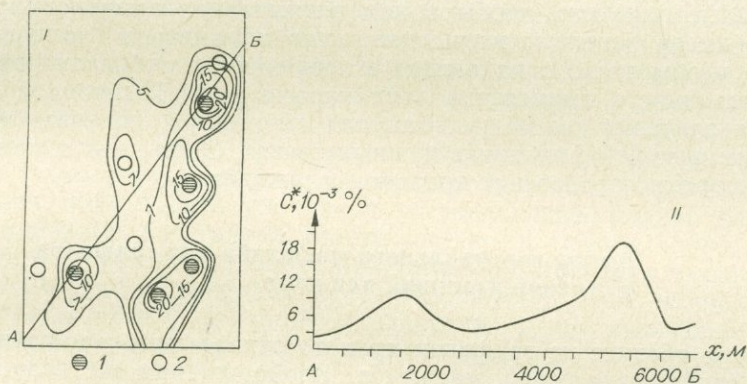


Рис. 30. Изображение поля концентраций свинца, полученное усреднением значений, использованных в рис. 29.

I — план изоконцентрат C^* ; II — график C^* по профилю AB; 1 — полиметаллические месторождения; 2 — рудопроявления, не представляющие практического интереса. Усреднение трехкратное, $m=2$ (раздельное по каждому профилю); $|\Delta|^* = 0,123$ (для логарифмов концентраций).

включающих эти максимумы, общей площадью в несколько раз меньше той, которая охватывается контуром I*.

На графиках (см. рис. 29 и 30) наглядно видна степень сглаживания наблюдаемых сигналов усреднением. Заметим, что, благодаря малым размерам окна и малой кратности усреднения, даже довольно локальные, но интенсивные полезные сигналы здесь остались после усреднения достаточно рельефными. Шумовые же сигналы сгладились сильнее, благодаря взаимной компенсации соответствующих им завышений и занижений значений $\lg C$.

При существенно меньшей величине шумов кратность усреднения была бы ниже и сглаживание — еще меньше. В таком случае, как упоминалось, согласно алгоритму аппроксимации второго ранга, может быть выбрано даже нулевое усреднение, т. е. при полезных сигналах,

* Выделение элювиально-делювиальных аномалий с целью поисков коренных месторождений является уже элементом интерпретации геохимических полей. При этом должен учитываться коэффициент перераспределения k_d (см. § 6, гл. IV). В рассмотренном примере это не вносит осложнений: здесь $k_d = 1$ на всей показанной площади.

достаточно интенсивных по сравнению с шумами, автоматически выбирается нужный вариант без усреднения.

Другие способы подавления шумов

Выделение полезных сигналов усреднением неудовлетворительно при существенно нелинейных изменениях выделяемой составляющей поля в пределах применяемого окна. В таких случаях более предпочтительна аппроксимация полезных сигналов параболой, логарифмическими параболой и другими функциями с оптимальным числом параметров (см. § 4, гл. I). Их применение для изучаемого пространства в целом относительно просто теоретически, но вызывает иногда серьезные вычислительные трудности. В частности, применение парабол высоких порядков с параметрами, вычисляемыми методом наименьших квадратов, связано с решением больших систем линейных уравнений, нередко плохо обусловленных. В таких случаях приходится идти на разбиение изучаемой площади на участки, данные по которым обрабатываются по отдельности.

Представляет интерес сочетание таких функций с применением скользящего окна. Тогда выбираются размеры скользящего окна, достаточно малые для того, чтобы в нем оптимальная аппроксимирующая функция имела заведомо невысокое число параметров (но достаточно большие, чтобы число попадающих в него точек опробования обеспечивало возможность вычисления этих параметров). Перемещая окно и вычисляя значения такой функции для его центра, получим значения аппроксимирующей функции в нужных точках. Здесь, как и при усреднении, возможно проведение кратного сглаживания.

Выбор вертикального масштаба для графиков и сечения изолиний для карт

По оси абсцисс на графиках принято откладывать расстояния в линейном (арифметическом) масштабе. Изображаемая же величина откладывается обычно по оси ординат со специальным выбором масштаба, в зависимости от целей.

Так, например, если ценность изображаемых сигналов прямо пропорциональна их абсолютной величине, то наиболее удобен наглядный арифметический масштаб. В остальных случаях целесообразнее использовать соответствующий функциональный масштаб. Так, если изучаемые факторы соответствуют второй статистической модели (см. § 2, гл. I), то удобен логарифмический масштаб (линейный для логарифмов).

Действительно, в последнем случае действие изучаемых факторов оценивается тем, во сколько раз они изменяют ту величину, к которой приложены (являющуюся фоном для их проявления). Тогда различие факторов выражается разностью величин аномалий в логарифмическом масштабе. Действия двух одинаковых факторов в таком случае проявляются одинаковыми аномалиями на графиках при любых фоновых значениях. В арифметическом же масштабе величина аномалии, создаваемой факторами указанного типа, пропорциональна фоновому значению, т. е. из двух одинаковых факторов более существенно проявляется тот, который создает аномалию на фоне достаточно большой абсолютной величины. В области же низкого фона относительное изменение поля даже в значительное число раз оказывается по абсолютной величине малым и незаметным для глаза в арифметическом масштабе (в пределах толщины линии графика).

Для простейшего визуального сглаживания шумов удобен масштаб, линейный для той функции, которая симметризует шумы: тогда вдоль

графика сохраняется ширина доверительного интервала определенной надежности и относительно легко судить о возможности отнесения какого-либо изменения к шумовым или выделяемым сигналам, выходящим за пределы этого интервала.

При построении карт в изолиниях требуется выбрать интервал значений поля, через который следует проводить эти линии, т. е. их сечение. Обозначим его Δ_A . Рассмотрим вначале случай, когда карта строится без подавления шумов или с подавлением, но без достижения оптимальной фильтрации, когда не все выделяющиеся сигналы целесообразно рассматривать как предположительно полезные.

В таком случае при малой величине Δ_A многие изолинии замыкаются вокруг шумовых сигналов, усложняя отображаемую картину. При увеличении же сечения уменьшается детальность изображения поля, увеличивается вероятность пропуска нужных сигналов. Поэтому сечение изолиний следует выбирать на основании экономических соображений, в зависимости от ожидаемой стоимости потерь при предполагаемых характеристиках шумов и полезных сигналов. Для наших целей будем считать заданной требуемую вероятность того, чтобы выделяемый по изолиниям сигнал не был шумовым, т. е. поставим в зависимость сечение изолиний от $\sigma(\Delta u)$ шумов. В геодезии и геофизике (гравиметрии) уже используется подобный принцип: сечение изолиний ставится в зависимость от погрешности измерений (но без симметризации). При таком подходе детальность изображения поля возрастает с подавлением шумов. Поэтому для выбора рационального сечения изолиний желательно знать изменение дисперсии шумов при их фильтрации. Рассмотрим случай, когда фильтрация производится путем усреднения функции, симметризирующей шум, причем требуется устранение из изображения поля только случайной составляющей, радиус корреляции которой меньше расстояния между соседними точками отбора проб.

Пусть u — значение симметризирующей функции для изучаемого поля, включающего выделяемую составляющую u_s и шумовую — Δu ; $\bar{u}^{(n)}$ — результат n -го усреднения значений u по скользящему окну. Тогда после первого усреднения имеем:

$$D(\Delta u^{(1)}) = \frac{1}{m_1} D(\Delta u),$$

где m_1 — число точек отбора проб, попадающих в окно при первом усреднении, $D(\Delta u)$ — дисперсия значений Δu в исходном поле (в целом).

Задачей второго усреднения является подавление той случайной составляющей поля значений $\bar{u}^{(1)}$, которая имеет радиус автокорреляции также меньше расстояния между точками отбора проб. Поэтому аналогично:

$$D(\overline{\Delta u}^{(2)}) = \frac{1}{m_2} \cdot D(\overline{\Delta u}^{(1)}) = \frac{1}{m_1 \cdot m_2} \cdot D(\Delta u).$$

Вообще, полагая m_i — число точек отбора проб, попадающих в окно при n -ом усреднении, получаем:

$$\left. \begin{aligned} D(\overline{\Delta u}^{(n)}) &= \frac{1}{\prod_{i=1}^n m_i} D(\Delta u), \\ \text{или, при } m_i &= \text{const } (i) = m: \\ D(\overline{\Delta u}^{(n)}) &= \frac{1}{m^{(n)}} D(\Delta u) \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Величина $D(\Delta u)$ может быть оценена по результатам повторного отбора проб, но тогда она может быть несколько занижена, так как

расстояние между точками отбора основных и контрольных проб обычно мало по сравнению с шагом отбора.

Если можно считать, что в пределах окна величина u_{ξ} меняется приближенно линейно (по сравнению с шумами), то, как указывалось, усреднение практически не меняет ее дисперсии, т. е. тогда можно принять

$$D(\bar{u}_{\xi}^{(n)}) = D(u_{\xi}). \quad (14)$$

Поскольку

$$D(u) = D(u_{\xi}) + D(\Delta u), \quad (15)$$

то

$$D(\bar{u}^{(n)}) = D(\bar{u}_{\xi}^{(n)}) + D(\overline{\Delta u}^{(n)}). \quad (16)$$

Используя для выражения (16) равенства (13) и (14), получаем:

$$D(\bar{u}^{(n)}) = D(u_{\xi}) + \frac{1}{\prod_{i=1}^n m_i} \cdot D(\Delta u). \quad (17)$$

Решая систему уравнений (15) и (17), находим:

$$D(u_{\xi}) = \frac{1}{\prod_{i=1}^n m_i - 1} \left(\prod_{i=1}^n m_i D(\bar{u}^{(n)}) - D(u) \right);$$

$$D(\Delta u) = \frac{\prod_{i=1}^n m_i}{\prod_{i=1}^n m_i - 1} \cdot (D(u) - D(\bar{u}^{(n)})), \quad (18)$$

или, при $m_i = \text{const}(i) = m$:

$$D(\Delta u) = \frac{m^n}{m^n - 1} \cdot (D(u) - D(\bar{u}^{(n)})). \quad (19)$$

Поскольку отклонение изменения u_{ξ} от линейного в пределах окна убывает с уменьшением размеров окна, то для повышения точности вычисления $D(\Delta u)$ можно произвести специальное однократное усреднение $n=1$ с минимальным окном, при котором $m=2$.

Узнав $D(\Delta u)$ и вычислив по формулам (13) величину $D(\overline{\Delta u}^{(n)})$, находим величину $\sigma = \sqrt{D(\overline{\Delta u}^{(n)})}$ для строящегося изображения поля.

Формулу (19) при $n=1$, $m=2$ можно применить для оценки σ шумов в изображаемом поле независимо от того, является ли оно результатом усреднения и по какому правилу производилось подавление шумов (например, согласно § 3, в определенных условиях усреднение концентраций должно производиться непосредственно, а не для симметризирующей функции). Действительно, производя выборочное вычисление значений $\bar{u}^{(1)}$ для изображаемого поля значений u (оно может быть исходным или результатом какой-то предварительной обработки данных, в частности n -кратного усреднения), получим $D(\Delta u)$ непосредственно для этого поля. Тогда для него принимается $\sigma = \sqrt{D(\Delta u)}$.

Предположим вначале, что изолинии проводятся по значениям $u(C)$.

Одна изолиния может огибать сигналы различной интенсивности. Две же изолинии одновременно могут замкнуться только вокруг сигнала, имеющего амплитуду больше Δ_d . Очевидно, что, чем меньше отношение средней амплитуды полезных сигналов к средней амплитуде шумовых, тем большая доля оконтуриваемых изолиниями площадей занята шумовыми сигналами. Поэтому для нахождения требуемого сечения

изолиний, при котором эта доля не превышает определенной заданной величины, рассмотрим случай, когда средняя амплитуда полезных сигналов равна нулю, т. е. изменения поля полезными сигналами отсутствуют, и фоном для шумовых сигналов является постоянная величина.

Пусть Λ_k — вероятность попадания величины шумового сигнала (Δu) в интервал $(-k\sigma, +k\sigma)$. Тогда $\Lambda_s = 1 - \Lambda_k$ — вероятность выхода этой величины за пределы такого интервала (доля числа проб или площади, где шумовые сигналы более интенсивны). Следовательно, принимая сечение изолиний равным ширине названного интервала, т. е. $\Delta_A = 2k\sigma$, по величине Λ_s найдем долю пространства, находящуюся внутри двух замыкающихся изолиний. Как указывалось, рассуждения проведены для случая отсутствия полезных сигналов. Учтем также, что одновременное замыкание третьей, четвертой и т. д. изолиний означает их наличие внутри двух первых внешних изолиний. Тогда получаем вывод: в произвольном случае, задавая $\Delta_A = 2k\sigma$, можно ожидать, что вокруг шумовых сигналов замкнется две или больше изолиний на доле пространства, не превышающей $\Lambda_s = 1 - \Lambda_k$. Во избежание недоразумений подчеркнем, что мы говорим о доле пространства, а не числа замыканий изолиний: одними и теми же изолиниями могут оконтуриваться не только отдельные шумовые сигналы, проявляющиеся в каждой из точек отбора проб, но и их совокупности в целом.

Карта в изолиниях для значений C получается из карты для $u(C)$ простым приписыванием построенным изолиниям соответствующих им значений C . Чтобы эти значения были удобными (выражались числами с небольшим количеством цифр), в выбор значений изолиний $u(C)$ предварительно вносятся необходимые коррективы.

Пример. По результатам контрольного вещественного анализа проб с логнормальным распределением ошибок установлено, что относительная погрешность для одного из изученных участков характеризуется величиной $\delta_{\sigma\%} = 50\%$. Требуется найти такое сечение изолиний концентраций, при котором случайные ошибки измерений вызывают оконтуривание двумя и более изолиниями не больше 5% изученного пространства (т. е. $\Lambda_s = 0,05$). Вычисления произвести для неусредненных данных и результатов 2-кратного усреднения логарифмов концентраций при $m = 9$ пробам.

По заданной величине $\delta_{\sigma\%}$ находим:

$$\delta_{\sigma} = \frac{\delta_{\sigma\%}}{100} + 1 = 1,5; \quad \sigma(\Delta \lg C) = \lg \delta_{\sigma} = 0,176; \quad \Lambda_k = 1 - \Lambda_s = 0,95.$$

Поскольку ошибки логарифмов концентраций распределены нормально, то величине $\Lambda_k = 0,95$, согласно таблицам для нормального распределения, соответствует $k = 2$. Следовательно, $\Delta_A = 2k\sigma = 2 \cdot 2 \cdot 0,176 = 0,704$. Это сечение изолиний для логарифмов концентраций при отсутствии усреднения. Беря антилогарифм, находим $5,06 \approx 5$ — кратность шкалы, по которой должны проводиться изолинии концентраций. При усреднении, согласно формулам (13), дисперсия ошибок значений $\lg C$ уменьшается в 9^2 раз, что соответствует уменьшению σ в 9 раз. Во столько же раз уменьшается сечение изолиний для логарифмов концентраций, т. е. в данном случае $\Delta_A = 0,704/9 \approx 0,078$. Беря антилогарифм, находим рекомендуемую для изолиний кратность шкалы концентраций 1,2.

Иногда не удается выдержать вычисляемые таким образом сечения изолиний из-за того, что в областях высоких градиентов полезных сигналов расстояние между изолиниями на плане оказывается меньше толщины линии. В таких случаях можно рекомендовать производить разрежение изолиний и разрыв части из них подобно тому, как это делается с изогипсами на топографических картах горных областей. Тогда вероятность замыкания изолиний вокруг шумовых сигналов дополнительно уменьшается.

То, что сказано о замыканиях изолиний, относится и к другим изменениям их формы (специфическим изгибам и т. п.), проявляющимся при наличии низкочастотной составляющей поля на ее фоне.

Форма изолиний на изображениях поля после оптимальной фильтрации определяется главным образом полезными сигналами. Поэтому линейная интерполяция между точками отбора проб, применяющаяся чаще всего при проведении изолиний, должна производиться с учетом формы этих сигналов, т. е. по значениям той функции, изменение которой достаточно близко к линейному. Например, при преимущественном изменении концентраций по экспонентам линейная интерполяция должна производиться не для концентраций, а для их логарифмов (логарифм экспоненты есть прямая). Сечение изолиний здесь определяется только удобством изображения выделяемых сигналов: оно принимается постоянным для той функции от C , для которой изменения поля достаточно близки к линейным, причем величина Δ_d делается настолько малой, насколько это возможно для наглядного графического изображения.

§ 5. ИЗОБРАЖЕНИЕ ПОЛЕЙ СТАТИСТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

Теоретические положения, рассмотренные в предыдущем параграфе для полей концентраций C , могут быть применены для изображения и других полей. Для этого достаточно подставить вместо C соответствующую величину.

Если изображение поля достаточно детально для изучения по нему каждого из сигналов, являющихся конечной целью исследований, то такое изображение мы будем называть крупномасштабным. Это определение согласуется с наиболее часто встречающимися прежними названиями. Так, при геохимических поисках рудных месторождений крупномасштабными обычно называются карты и графики, где отображаются ореолы отдельных рудных тел.

С уменьшением масштаба изображения изучение по нему указанных сигналов становится невозможным. Поэтому на мелкомасштабных картах приходится отображать лишь статистические параметры (характеристики) совокупностей сигналов в целом. К подобным изображениям в традиционной практике относятся, например, металлогенические и прогнозные карты, где отображаются зоны предполагаемого положения месторождений полезных ископаемых.

Рассмотрим статистические параметры, отображение полей которых представляется сейчас особенно нужным.

Дисперсия и корреляция

Прежде всего рассмотрим построение поля дисперсии ошибок, знание которого может быть необходимо в указанных выше случаях для построения поля концентраций, когда в качестве шумов выступают ошибки наблюдений. Для простоты рассуждений будем полагать, что ошибки вычисляются по результатам равнооточных первого и второго (возможно, контрольного) отборов проб или анализа одних и тех же проб в зависимости от того, что принимается за шумы. Систематическое расхождение результатов будем считать исключением на основании положений § 2 гл. II.

Пусть $C_1(r_i)$ и $C_2(r_i)$ — результаты первого и второго наблюдений (измерений) концентраций элемента μ в i -й точке отбора проб. Тогда при сделанных оговорках, с учетом смены обозначений, аналогично формуле (19, § 2, гл. II) получаем:

$$D(\Delta u(C(r_i))) = \frac{1}{m-1} \sum_{j=1}^m (u(C_j(r_i)) - \overline{u(C(r_i))})^2. \quad (1)$$

В рассматриваемом случае $m=2$, $\overline{u(C(r_i))} = 1/2(u(C_1(r_i)) + u(C_2(r_i)))$. Подставляя эти значения в (1), получаем:

$$D(\Delta u(C(r_i))) = 1/4[(u(C_1(r_i)) - u(C_2(r_i)))^2 + (u(C_2(r_i)) - u(C_1(r_i)))^2] = 1/2(u(C_1(r_i)) - u(C_2(r_i)))^2. \quad (2)$$

Эта величина, будучи вычисленной всего по двум значениям концентраций, зависит, естественно, от случайных факторов, и ее поле подлежит описанной выше аппроксимации. Как и для поля концентраций, здесь может быть выбрана аппроксимирующая функция для изучаемого пространства в целом или же, для упрощения вычислений, строится поле ее значений с помощью скользящего окна.

Если мы ограничиваемся вычислением погрешностей для изучения распределения измеряемых величин C и не знаем распределения ошибок этих погрешностей, то, естественно, при аппроксимации поля дисперсии по значениям (2) следует использовать критерий первого рода.

Большую самостоятельную роль может играть аппроксимация поля природной дисперсии. Эта величина отражает неоднородность, контрастность распределения вещества и поэтому имеет существенное значение для суждения о процессах его перераспределения, в частности о процессах рудообразования, что важно для поисковых работ. Это отражено детальнее в статьях (Дубов, 1965; Таусон и др., 1965). Изображение изменения дисперсии в пространстве оказывается зачастую весьма наглядным для изучения ряда процессов: согласно § 3 гл. I, величина $\sigma(u(C)) = \sqrt{D(u(C))}$ отражает действие совокупности факторов F , в то время как величина $\sigma(C) = \sqrt{D(C)}$ зависит еще и от ξ . Поэтому при малой величине ошибок или после исключения связанной с ними дисперсии поле значений $D(u(C))$ или $\sigma(u(C)) = \sqrt{D(u(C))}$ отображает наиболее наглядно интенсивность процессов, которые приводили к перераспределению вещества. Для каждого положения скользящего окна вычисляется значение природной дисперсии. Это значение приписывается центру окна. Совокупность таких значений используется для последующей аппроксимации поля дисперсии способом, выбираемым в зависимости от технических возможностей. При этом могут быть использованы параметрическая функция, единая для всего изучаемого пространства, или построения со скользящим окном. Таким образом, поле значений дисперсии, полученных с помощью одного скользящего окна, может быть подвергнуто сглаживанию с помощью другого скользящего окна. При сравнительно больших размерах первого из этих окон шумы в полученных значениях дисперсии могут оказаться достаточно малыми для отказа от последующего сглаживания.

Пример. На рис. 31, 32, 33 изображены соответственно геологическая карта, карта концентраций и карта дисперсии логарифмов концентраций свинца по результатам опробования элювия — делювия одного из рудных районов Восточного Забайкалья.

На рис. 32 центральная группа месторождений отмечается вытянутой зоной повышенных концентраций с осевой линией, изгибающейся в явном соответствии с местами оруденения (здесь, как и в предыдущем примере, $k_d \approx 1$).

На рис. 33 также обнаруживается приуроченность аномалий дисперсии к территориям оруденения, но здесь видно разделение поля на почти прямоугольные блоки с границами, простирающимися преимущественно в северо-восточном и северо-западном направлениях. Между границами блоков, отмечаемых сгущением изолиний, т. е. высоким градиентом дисперсии, в пределах каждого блока дисперсия меняется меньше.

Эта картина находится в согласии с гипотезой о связи месторождений района с блоковой тектоникой, которая была завуалирована по-

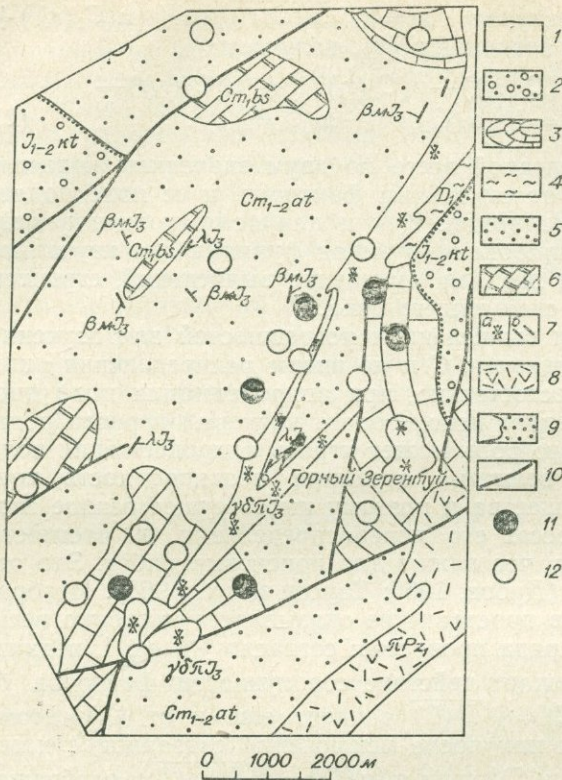


Рис. 31. Схематическая геологическая карта одного из районов Восточного Забайкалья (выкопировка с карты, составленной А. П. Семкиной в 1967 г. по данным А. А. Локермана, Л. Н. Ленок, М. И. Стецюка).

Современный отдел: 1 — пески, галечники, суглинки. Юрская система: 2 — нижний — средний отделы, калганская свита (J_{1-2kt}) — песчанники, аргиллиты, местами конгломераты; 3 — средний отдел кембрийской — нижний отдел силурийской систем, нерчинско-заводская свита ($Cm_2 - S_{1nr}$) — доломиты с прослоями глинистых сланцев. Девонская система: 4 — нижний — средний отделы, благодатская свита — аргиллиты с прослоями известняков и песчанников. Кембрийская система: 5 — нижний — средний отделы, алтайская свита (Cm_{1-2at}) — филлитовидные сланцы, алеволиты, прослой известняков и песчанников; 6 — нижний отдел, быстрицкая свита (Cm_{1bs}) — доломиты, известняки с прослоями филлитовидных сланцев. Верхнеюрские интрузии: 7a — гранодиорит-порфиры (γ_{7aJ_3}) и граносиенит-порфиры (γ_{7bJ_3}), 7b — лампрофиры (λ_{J_3}), диабазовые порфиры (β_{J_3}), кварцевые порфиры (λ_{J_3}) и фельзит-порфиры. 8 — нижнепалеозойские порфиры (γ_{7cJ_3}); 9 — ореолы контактного метаморфизма; 10 — тектонические нарушения; 11 — полиметаллические месторождения; 12 — полиметаллические рудопроявления.

следующими процессами. Визуальное наблюдение ее затруднено также наличием рыхлого покрова. Поэтому обнаруживаемые теперь тектонические нарушения могут не отражать ее. Разные блоки были нарушены тектонически в разной степени, и в разной степени проявились процессы изменения пород растворами, двигавшимися по трещинам. Согласно рис. 31, горные породы представлены здесь в основном теми разностями, которые при отсутствии наложенных химических процессов имеют гораздо более низкие концентрации свинца, чем зафиксированные на рис. 32. Поэтому наблюдаемые концентрации свинца отражают упомянутые процессы. Эти концентрации распределены приблизительно логнормально. Поэтому, согласно второй статистической модели и сказанному выше о величинах $D(u(C))$, отражением интенсивности процессов (зависящей здесь от тектонической нарушенности пород) является дисперсия логарифмов концентраций свинца.

Перемешивание материала рыхлых пород может приводить к существенному уменьшению величин $D(u(C))$ (Дубов, Фурсов, 1966). Поскольку дисперсия ограничена снизу нулем, то такое уменьшение в среднем больше сказывается на больших значениях, т. е. аномалии значений $D(u(C))$ в рыхлых образованиях преимущественно сглажены по сравнению с аномалиями в находящихся под ними коренных породах. Поэтому можно полагать, что картина, фиксируемая на рис. 33, была бы еще более рельефной, если бы она была построена по результатам опробования коренных пород.

Подчеркнем, что при подобных построениях карты разных статистических характеристик могут относиться к разным составляющим поля концентраций. В частности, на рис. 32 показана составляющая поля концентраций, отображающая месторождения и их группы. На рис. 33 показана дисперсия более высокочастотной составляющей, изменения которой фиксируются по отдельным пробам. Эти изменения концент-

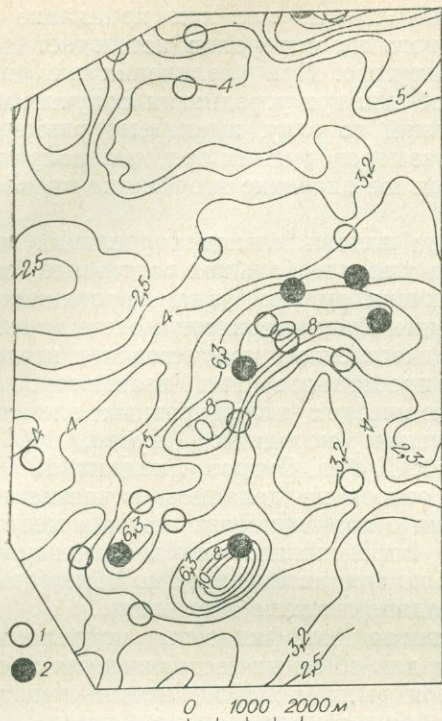


Рис. 32. Карта концентраций свинца для района, показанного на рис. 31 (первичные материалы заимствованы у Б. М. и Н. Л. Васильевых, в построении принимала участие В. А. Найгебауэр). Усреднение трехкратное, скользящее окно $500 \text{ м} \times 1 \text{ км}$.

1 — рудопоявления; 2 — месторождения.

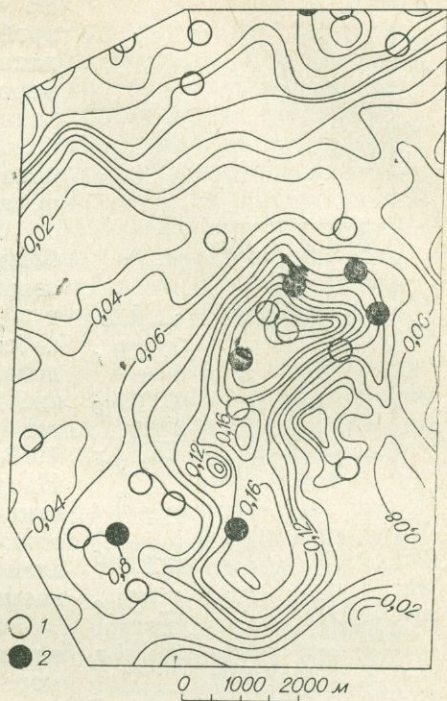


Рис. 33. Карта дисперсии логарифмов концентраций свинца для района, показанного на рис. 31 (первичные материалы заимствованы у Б. М. и Н. Л. Васильевых, в построении принимала участие В. А. Найгебауэр). Скользящее окно $2 \text{ км} \times 2 \text{ км}$.

1 — рудопоявления; 2 — месторождения.

раций не могут быть изображены непосредственно в относительно мелком масштабе данных рисунков.

Вместо полей дисперсии могут строиться поля средних квадратических или абсолютных отклонений (вычисление последних несколько проще, если не требуется проведение дисперсионного анализа, использующего аддитивность дисперсии независимых величин).

Вычисляя по скользящему окну коэффициент корреляции, получим изображение поля корреляции. Оно также может строиться для различных составляющих поля концентраций, отображая соответствующие геохимические связи. Для этого коэффициент корреляции вычисляется либо для наблюдаемых значений концентраций, либо для значений, полученных при предварительной аппроксимации соответствующей составляющей поля.

Заметим, что при этом для одних и тех же элементов в одном и том же районе могут быть получены резко отличные значения коэффициента корреляции (что ранее не обращало на себя внимание исследователей).

Действительно, представим себе корреляцию двух элементов, образующих единые рудные тела, но разделенных внутри них. Такими элементами являются, например, свинец и цинк, рудные минералы которых, соответственно галенит и сфалерит, обычно скапливаются в разных частях рудных тел. Если подсчитывать коэффициент корреляции между ними по микропробам, имеющим размеры много меньше размеров отдельных минеральных зерен, то этот коэффициент должен быть заведо-

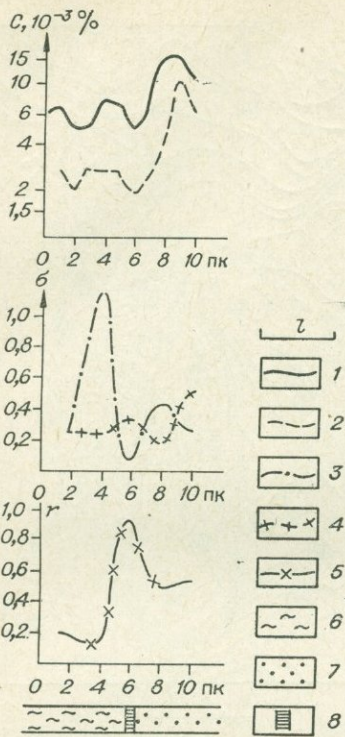


Рис. 34. Графики основных геохимических характеристик (по материалам Центральной геохимической экспедиции Каз-геофизтреста).

1 — величина скользящего окна; ПК — пикеты металлотрической съемки, шаг съемки 20 м; 1, 2 — концентрации соответственно свинца и молибдена; 3, 4 — соответствующие средние квадратические отклонения логарифмов концентраций этих элементов; 5 — коэффициент корреляции логарифмов их концентраций; 6 — конгломераты, песчаники и сланцы; 7 — аллювий, залегающий на этих породах; 8 — тектоническая зона.

не выделяющаяся непосредственно по графикам C и $\sigma(\lg C)$, хорошо отражается на графике r .

Здесь, как и в случае дисперсии, также могут быть применены аппроксимация изучаемой величины параметрической функцией для всего опробованного пространства в целом или выделение полезной составляющей с помощью специального скользящего окна.

Перспективность

В работе (Дубов, 1965) довольно детально рассматривался вопрос о количественной оценке перспективности (Π) для детализационных геохимических работ в исследуемом районе, когда сеть проведенного (предварительного, оценочного, мелкомасштабного) отбора проб недостаточно густа для выявления и описания всех искомым объектов. Напомним основное определение.

Мысленно разобьем изучаемое геологическое пространство \mathcal{U} на одинаковые участки (подпространства) $\Delta \mathcal{U}$ таких размеров, которые при-

мо отрицательным, так как попадание в пробу одного из минералов исключает попадание другого. При увеличении же размеров проб или при усреднении получаемых концентраций по окну, имеющему размеры больше размеров рудных тел, мы получим положительное значение коэффициента корреляции.

Иногда положительная корреляция наблюдается для еще больших расстояний, соответствующих рудным узлам, провинциям и т. д. Такие закономерности можно видеть и без количественных подсчетов при исследовании пространственных взаимоотношений геохимических полей разных элементов прежними методами (Дубов, 1958₁, 1958₂, 1961; Дубов, Бугров, Гладких, 1959). На этом основании делались, в частности, заключения о возможностях поисков месторождений определенных нерадиоактивных элементов по сравнительно легко обнаруживаемым радиоактивным аномалиям.

Сравнивая коэффициенты корреляции элементов для обычных геохимических проб коренных и рыхлых пород, можно видеть, что в последних из-за перемешивания материала положительные связи наблюдаются чаще.

Таким образом, поля корреляции, оцениваемые для различных составляющих полей концентраций, дают информацию о степени связей разных элементов в геохимических процессах.

Графики и карты коэффициентов корреляции иногда могут существенно дополнить представление об изучаемом районе.

Для примера на рис. 34 показаны графики C , $\sigma(\lg C)$ и коэффициента корреляции r логарифмов концентраций свинца и молибдена. Как видим, тектоническая зона,

мерно характерны для искоемых объектов или очистных выемок рудодобывающих предприятий. Такой выбор размеров зависит от характера искоемых объектов и целей исследований: если, например, опробуются рыхлые образования и выявляемые объекты на соответствующем этапе — геохимические ореолы, то речь идет о размерах тех их частей, которые имеют (предположительно) обнаруживаемые или интересующие исследователя концентрации. Если же опробуются рудовмещающие породы с целью выявления промышленных рудных тел, то рассматриваются размеры выработок, которые будут использоваться для выемки этих тел. В зависимости от средней концентрации руды в этих выработках они являются рентабельными или нерентабельными, поэтому при решении экономических вопросов бывает целесообразнее говорить об их размерах, а не размерах рудных тел.

Обозначим через C_6 «благоприятные» концентрации μ в $\Delta\mathcal{U}$ — те концентрации, которые являются признаками выявляемых объектов; C_{m6} — минимальная благоприятная концентрация (например, та, которая принимается минимальной для среднего содержания добываемой руды в очистной выработке).

Перспективностью пространства \mathcal{U} названо математическое ожидание суммарной продуктивности тех из выделенных участков $\Delta\mathcal{U}$, где концентрации μ оказались в пределах C_6 (при всех возможных для выбранной системы разбиениях \mathcal{U} на $\Delta\mathcal{U}$).

В случае трехмерного пространства \mathcal{U} перспективность, по определению, близка к промышленным запасам μ , но отличается от них тем, что при подсчете промышленных запасов используется некоторое заданное по результатам разведочных работ разбиение \mathcal{U} в зависимости от положения конкретных рудных тел. Разбиение же пространства при определении перспективности, производящееся без учета результатов разведочных работ, не связано этой зависимостью, и большее число участков $\Delta\mathcal{U}$ может попасть в число «непромышленных» из-за пересечения границами промышленного оруденения и захвата безрудных вмещающих пород.

Определенная таким образом величина Π , приходящаяся на единицу изучаемого пространства, названа удельной перспективностью. Она определяется формулой

$$\Pi_y = \int_{C_6} C \cdot p(C) dC. \quad (3)$$

Здесь C — концентрация, определяемая как количество μ в $\Delta\mathcal{U}$, деленное на объем $\Delta\mathcal{U}$, причем в зависимости от целей исследований в подсчет могут включаться только концентрации, относящиеся к определенным геологическим условиям, минералам и т. п.

Справедливость выражения (3) очевидна, если учесть, что в правой части стоит значение $M(C) | (C \in C_6)$ — математическое ожидание концентрации на тех участках, где C входит в интервал благоприятных величин. Если умножить это значение на \mathcal{U} , то получим количество μ в таких участках, т. е. перспективность. Следовательно, формула (3) определяет удельную перспективность.

Оценка функции $p(C)$ по результатам реального геохимического опробования при указанном смысле величины C может представлять значительные трудности. Тогда вместо величин Π и Π_y можно использовать положительно коррелированные с ними, но легче вычисляемые величины, о которых речь будет идти ниже. Любую из таких величин, по которым можно сравнивать при прочих равных условиях перспективность или удельную перспективность изучаемых пространств, назовем соответственно относительной перспективностью (Π') и относительной удельной перспективностью (Π'_y).

Вычисляя оценки Π_y или Π'_y для каждого положения скользящего окна (и проводя затем, в случае необходимости, подавление помех), получим аппроксимацию поля перспективности.

Рассмотрим вначале случай, когда величина Π_y определяется для самого опробуемого пространства \mathcal{U} (например, при оценке перспектив обнаружения оруденения μ в определенных горных породах по результатам примерно равномерного их опробования по относительно редкой сети скважин). Тогда в формулу (3) вместо $p(C)$ следует подставить аппроксимирующую функцию (определение которой см. в § 4 гл. I и § 2 гл. II) с выделением природной составляющей и подавлением шумов, а также с учетом положений, изложенных в § 2 данной главы, для перехода от распределения μ в относительно малых пробах к распределению величин C , определяемых для объемов $\Delta\mathcal{U}$.

При технических затруднениях в выполнении таких пересчетов может быть вычислена, как указывалось, положительно коррелированная с Π_y величина относительной удельной перспективности Π_y . В рассматриваемом случае ее можно получить, если подставить в формулу (3) вместо $p(C)$ функцию, аппроксимирующую распределение концентраций непосредственно по отобранным пробам (но также, в общем случае, с выделением природной составляющей и подавлением шумов). Если пренебречь влиянием шумов, то вычисления особенно упрощаются.

Пример. Предположим, что при аппроксимации распределения концентраций элемента μ установлено приближенно логнормальное распределение его по отобранным пробам. Тогда, подставляя в формулу (3) вместо $p(C)$ формулу (15, § 2, гл. I) и интегрируя по области значений $C_0 = (C_{mb}, \infty)$, получаем, с учетом смены обозначений,

$$\Pi'_y = \frac{1}{2} \exp\left(\frac{2 \cdot \overline{\ln C} + (\sigma(\ln C))^2}{2}\right) \cdot \left[1 - \Phi\left(\frac{\ln C_{mb} - \overline{\ln C} - (\sigma(\ln C))^2}{\sigma(\ln C)}\right)\right] \quad (4)$$

или

$$\Pi'_y = \frac{1}{2} \bar{C} \left[1 - \Phi\left(\frac{\ln C_{mb} - \overline{\ln C} - (\sigma(\ln C))^2}{\sigma(\ln C)}\right)\right], \quad (5)$$

где \bar{C} , $\overline{\ln C}$ и $\sigma(\ln C)$ — параметры, вычисляемые по результатам опробования для каждого положения скользящего окна. Десятичные логарифмы, обычно применяемые в формулах типа (15, § 2, гл. I), здесь заменены натуральными, поскольку выражения (4) и (5) предназначены главным образом для машинного счета, при котором натуральные логарифмы обычно удобнее. При построении карт параметры \bar{C} , $\overline{\ln C}$ и $\sigma(\ln C)$ вычисляются для каждого положения скользящего окна. Если же вычислить их для всего пространства \mathcal{U} в целом, то полученное значение Π'_y явится средней характеристикой для \mathcal{U} . Тогда, умножив Π'_y на \mathcal{U} , получим относительную перспективность Π' этого пространства (для сравнения с Π' других аналогичных по геологическим условиям исследованных пространств).

Оценки относительной перспективности такого рода удобно использовать при разведке месторождений, когда требуется решить вопрос о перспективах сгущения сети горных выработок для обнаружения еще не известных рудных тел (Дубов, 1965).

При отсутствии автоматической счетной техники и необходимости быстрых прикидок вычисления оценок величины Π'_y можно еще более упростить, как это делалось в первых опытах автора (Дубов, 1969₂, 1971₂, и др.): заменяя в формуле (3) интеграл конечной суммой, полу-

чаем после простейших преобразований выражение

$$P_y'^* = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m_0} C_{6i}$$

Здесь C_{6i} — концентрации вещества μ в пробах, оказавшиеся в пределах C_6 ; m_0 — количество проб с такими концентрациями, попавших в скользящее окно в том его положении, для которого вычисляется $P_y'^*$; m — общее количество проб, попадающих в окно. Заметим также, что с величиной $P_y'^*$ положительно коррелирована величина m_0/m . Ее вычисление крайне просто и может быть использовано для построения карт, которые иногда дают довольно наглядную картину ориентировочного расположения перспективных участков (Дубов, 1971₂).

После некоторых преобразований описанный аппарат иногда можно применить и при поисках оруденения в пространстве V , выходящем за границы опробуемого пространства \mathcal{U} , например при поисках коренного оруденения по данным опробования рыхлых пород.

В частности, если такие поиски ведутся по данным опробования элювия — делювия, когда искомым объектам соответствуют остаточные ореолы, то в качестве C_6 должен быть выбран диапазон концентраций, характерный для названных ореолов. Тогда величины наблюдаемых концентраций при расчетах целесообразно заменить их произведениями на коэффициент k_h (равный $1/k_d$), учитывающий отчасти гипергенные преобразования коренных пород и отбор определенной фракции рыхлых образований (подробнее об этом коэффициенте сказано в гл. IV и V). В таком случае P_y' определяется как удельная величина продуктивности ореолов в области концентраций C_6 и соответствующих им выходов рудных тел.

Описанный аппарат не всегда оптимален для оценки величины P_y даже в случаях опробования рудовмещающих горных пород. Чувствительность и точность вещественного анализа проб на μ может быть недостаточной для уверенной фиксации рудных тел и их ореолов при относительно редкой сети поискового опробования. Между тем другие вещества μ_i могут быть более благоприятными для этой цели (к ним могут относиться элементы-индикаторы, различные химические образования в зонах метасоматоза и т. д.). В таком случае естественно применить регрессию величин Π и P_y на признаки q , вычисляемые по наблюдаемому распределению веществ μ_i . Оптимальная функция регрессии при этом может быть выбрана на основании алгоритмов аппроксимации при подстановке в них величин Π и P_y вместо φ , наблюдаемых оценок Π_r и $P_{y,r}$ этих величин — вместо f , и $\{q\}$ — вместо r (т. е. каждый из признаков q рассматривается в качестве координаты пространства признаков). В результате в качестве φ^* получают оценки Π^* и P_y^* .

В качестве признаков $q=q_i$ могут быть приняты, например, средние аномальные концентрации соответствующих элементов $\mu=\mu_i$ по скользящему окну. В случае поиска коренного оруденения по рыхлым образованиям эти концентрации могут быть умножены на упоминавшийся коэффициент k_h .

Под величинами Π и P_y могут пониматься не только продуктивности и удельные продуктивности поверхности коренных пород, но и запасы или удельные запасы искоемых руд. Удельными запасами здесь считаются запасы во всем диапазоне доступных глубин, приходящиеся на единицу земной поверхности. В случае линейного скользящего окна под P_y может подразумеваться удельная продуктивность вертикальной полосы, ограниченной сверху этим окном.

Для увеличения количества используемого материала и упрощения построения функции P_y^* при съемках по коренным породам можно ис-

пользовать значения q_i по линейному скользящему окну, перемещаемому по различным горизонталям на разрезах опробованных месторождений. При этом каждое значение Π_y вычисляется по части вертикальной полосы разреза, находящейся под скользящим окном. Вычисляемая при этом аппроксимирующая функция, устанавливающая соответствие между $\{q_i\}$ по линейному окну и Π_y^* по двумерной полосе под ним, может быть использована затем как приближенное соответствие между $\{q_i\}$ по площадному окну и величиной Π_y^* по объему под таким окном*.

В качестве простейшей может быть использована функция линейной регрессии

$$\Pi_y^* = A + \sum_{i=0}^L K_i \cdot q_i, \quad (6)$$

где L — число используемых веществ-индикаторов μ_i (под μ_0 здесь понимается то вещество, для которого подсчитывается Π_y^*), A и K_i — некоторые коэффициенты, задаваемые априори или находимые по алгоритму аппроксимации первого ранга.

Заметим, что если скользящее окно захватывает только одну точку отбора проб и q_i — концентрации элементов, то при априорном принятии $A=0$, $K_i=\pm 1$ (для всех i) из формулы (6) в качестве частного случая получается одна из известных форм так называемого геохимического показателя, выражаемая через суммы и разности концентраций.

Второй по простоте можно назвать формулу

$$\Pi_y^* = A \cdot \prod_{i=0}^L q_i^{K_i} \quad (7)$$

или, что то же самое,

$$\lg \Pi_y^* = \lg A + \sum_{i=0}^L K_j \cdot \lg q_i \quad (8)$$

(линейная регрессия логарифмов).

При попадании в скользящее окно точки отбора проб в случае, когда q_i — концентрации и априори принимается $A=1$, $K_j=\pm 1$, из формулы (7) в качестве частного случая получается известная форма геохимического показателя, выражаемая через произведения и частные от деления концентраций элементов. Заметим, что такая форма применялась задолго до описываемых общих положений и, несмотря на отсутствие учета изменчивости параметров регрессии, давала в определенных условиях хорошие результаты. В частности, при опробовании рудовмещающих пород, когда требовалось увеличить надежность выявления первичных ореолов рудных тел, заслуживающие внимания данные были получены при изображении ореолов по значениям произведений концентраций элементов (Овчинников, Григорян, 1970; Григорян, Туманян, 1971). Разумеется, при подобных упрощениях вычисляемая величина Π_y^* не является состоятельной оценкой для Π_y , но определенным образом коррелирована с ней и потому помогает при выявлении перспективных участков.

С увеличением числа используемых функций и повышением ранга аппроксимации, очевидно, можно ожидать рост положительного эффекта от подобных построений. Пока практический опыт в этом отношении мал.

* Это нетрудно видеть, если учесть, что линейная продуктивность по окну длиной l_x численно равна площадной продуктивности по окну той же длины и шириной $l_y = 1$, а площадная продуктивность по полосе разреза шириной l_x и длиной (глубиной) l_z численно равна объемной продуктивности параллелепипеда такой же ширины и длины при толщине $l_y = 1$.

Если ведется поиск месторождений, которые могут разрабатываться на комплекс элементов $\{\mu_0^{(i)}\}_{i=1}^m$, то для каждого из этих элементов находится соответствующая ему величина $P_y^*(\mu_0^{(i)})$. Тогда для сравнения перспектив разных частей какого-либо изучаемого района необходимо введение единого показателя, учитывающего относительную ценность каждого из элементов $\mu_0^{(i)}$. В качестве такого показателя (вычисляемого также для каждого положения скользящего окна) можно принять величину

$$P_y^* = \sum_{i=1}^m V_i \cdot P_y^*(\mu_0^{(i)}), \quad (9)$$

где V_i — коэффициенты, выражающие стоимость единицы запасов соответствующих элементов.

Один и тот же элемент может входить в это выражение в нескольких позициях: как экономически самостоятельно важный и как индикатор другого экономически важного элемента, т. е. быть связанным с его рудами положительной или отрицательной корреляцией. Так, цинк может служить индикатором свинцовых месторождений, а также быть элементом попутной добычи. Такую же роль по отношению к нему может играть свинец.

Оптимальные размеры окна при построении поля удельной перспективности определяются решаемыми задачами аналогично тому, как это было сказано для построения полей концентрации, дисперсии и корреляции. Но есть здесь и следующая специфика.

Признаки, проявляющиеся в V , меняются от точки к точке. Определенные их характеристики зачастую могут быть получены лишь статистически по достаточно большому окну. Так, например, из-за смещений рыхлого покрова бывает затруднительно сказать, какому рудному телу соответствует наблюдаемый в этом покрове ореол. И лишь при увеличении скользящего окна становится возможным сказать с достаточной малой относительной ошибкой, что вычисляемые по нему значения q_j связаны практически полностью с объектами, залегающими в коренных породах под ним.

При вычислениях P_y и P_y' с использованием выражения (3) окно должно включать число точек, достаточное для вычисления параметров функции, аппроксимирующей функцию $p(C)$.

Для уменьшения искажений, вызываемых применением скользящего окна больших размеров, можно применить способ, описываемый в следующем разделе.

Регрессию на наблюдаемые признаки можно вычислять не только для запасов месторождений, но и для других их параметров: глубины залегания, размеров рудных тел и т. д. При вычислении величины P можно учесть затраты на поиски и разведку месторождений и оценивать наиболее вероятную прибыль от последующих детализационных работ в различных частях изучаемой территории.

§ 6. ПОПРАВКА НА УСРЕДНЕНИЕ

При изучении многих полей фактически невозможно измерить нужную величину в определенной точке, и приходится довольствоваться некоторым средним ее значением в «объеме влияния», окружающем эту точку.

Так, в атомно-абсорбционных газоанализаторах концентрация μ оценивается по поглощению луча света определенной длины волны в кювете, через которую пропускается газ (Автоматические газоанализаторы, 1961). При этом на результат измерения влияет весь газ, через

который проходит луч, воздействующий на фотоэлемент. Следовательно, получаемая оценка концентрации при отсутствии ошибок измерений была бы равна количеству этого газа, деленному на его объем. Это означает, что происходит усреднение влияния как флуктуаций газа по поперечному сечению и вдоль луча света, так и изменений концентраций вдоль кюветы, связанных с изучаемыми изменениями во времени потока газа на ее входе (такие изменения интересны, например, при исследовании форм вхождения элементов в минералы по их возгонке с разверткой во времени).

В начале данной главы мы писали, что концентрация, приписываемая точке r опробования, в действительности есть средняя концентрация по объему пробы. Обычно размеры пробы заведомо достаточно малы, чтобы можно было этим пренебречь. Но могут встретиться случаи, когда такое усреднение желательно учесть.

С точки зрения математики, аналогичное искажение происходит при группировании данных и при усреднении, производимом по скользящему окну. Как указывалось выше, размеры окна в определенных случаях должны выбираться по необходимости гораздо больше тех, которые являются оптимальными для подавления шумов и выделения полезных сигналов. Между тем, может представлять интерес то поле, которое наблюдалось бы без избыточного усреднения, вносимого такими вычислениями.

Никакие математические операции в рассматриваемых случаях не могут восстановить изучаемую функцию по числу измененных (усредненных) ее значений, меньшему числа неизвестных ее параметров. Однако, как будет показано, влияние усреднения может быть снято для той составляющей поля, которая определяется числом параметров, равным числу полученных значений. При опробовании это число равно числу проб. Поэтому, например, после поправки на усреднение материала больших проб (бороздовых, объединенных и др.) можно ожидать лишь увеличение рельефности изображения поля — повышение максимумов и углубление минимумов. При непрерывной же записи измерений упоминавшихся газоанализаторов в принципе можно рассчитывать на полное восстановление сигналов, усреднявшихся вдоль кюветы. При усреднении вычислениями по скользящему окну число получаемых значений зависит от числа остановок окна. В связи с его перекрытиями можно получить довольно подробную картину восстановленного поля.

Принципиальную возможность такого восстановления, выражающего поправку на усреднение, представляет решение системы уравнений, отображающих усреднение. Однако это решение обычными способами в рассматриваемых нами случаях чрезмерно трудоемко, и более удобным оказался способ, базирующийся на следующих положениях.

Пусть вдоль оси Ox задана функция $Z(x)$. Тогда усреднение (однократное) по линейному скользящему окну длиной l на этой оси приводит к получению значений

$$\bar{Z}_l(x) = \frac{1}{l} \int_{x-l/2}^{x+l/2} Z(\xi) d\xi.$$

$$\text{Отсюда: } \frac{\partial \bar{Z}_l(x)}{\partial x} = \frac{1}{l} [Z(x+l/2) - Z(x-l/2)];$$

$$Z(x+l/2) = Z(x-l/2) + l \cdot \frac{\partial \bar{Z}_l(x)}{\partial x}.$$

Для точки $x = x_0 + (j-1/2) \cdot l$ получаем:

$$Z(x_0 + j \cdot l) = Z(x_0 + (j-1) \cdot l) + l \cdot \frac{\partial \bar{Z}_l(x_0 + (j-1/2) \cdot l)}{\partial x}.$$

Полагая $j=i, (i-1), (i-2), \dots, 1$, где i — целое, получаем рекурсивно:

$$Z(x_0 + i \cdot l) = Z(x_0 + (i-1) \cdot l) + l \cdot \frac{\partial \bar{Z}_l(x_0 + (i-1/2) \cdot l)}{\partial x},$$

$$Z(x_0 + (i-1) \cdot l) = Z(x_0 + (i-2) \cdot l) + l \cdot \frac{\partial \bar{Z}_l(x_0 + ((i-1) - 1/2) \cdot l)}{\partial x},$$

.

$$Z(x_0 + l) = Z(x_0) + l \cdot \frac{\partial \bar{Z}_l(x_0 + (1/2) \cdot l)}{\partial x}.$$

Подставляя каждое последующее выражение в предыдущее, получаем:

$$Z(x_0 + i \cdot l) = Z(x_0) + l \sum_{j=1}^i \frac{\partial \bar{Z}_l(x_0 + (j-1/2) \cdot l)}{\partial x}. \quad (1)$$

Следовательно, зная функцию $\bar{Z}_l(x)$, можно вычислить для ряда точек, удаленных друг от друга на расстояние l , значения $Z(x)$, не измененные усреднением, если известно значение $Z(x_0)$ в какой-то точке x_0 .

Чтобы получить значения $Z(x)$ в точках, удаленных друг от друга на расстояние меньше l , формула (1) должна быть применена при разных x_0 , заполняющих отрезок длиной l . Такие точки с известными значениями $Z(x_0)$ можно иметь практически почти всегда, выбирая или создавая на кривой $\bar{Z}_l(x)$ приближенно линейный участок, где заведомо можно принять $\bar{Z}_l(x) = Z(x)$.

При работе с газоанализатором такой участок можно создать пропуская через кювету окружающего воздуха или использовать эталонные (проверочные) измерения на стандартных образцах. При отборе бороздовых проб для такой цели можно выводить линии отбора на относительно однородные горные породы (к ним относятся и породы, в которых концентрации μ пренебрежимо малы). При построении статистического закона по накопительной кривой всегда можно добавить слева интервал группирования, куда не попало ни одного из группированных значений.

Если \bar{Z}_l вычисляется по скользящему окну, то изображение поля на изучаемом участке оси Ox можно дополнить с любой стороны заведомо известными постоянными значениями и проводить вычисления с захватом этих значений.

Предположим, например, что требуется построить функцию C^* по отрезку $[x_m; x_s]$ профиля, где часть значений C оказалась ниже порога чувствительности, и поэтому выбрано скользящее окно относительно большой ширины l для проведения по нему статистических построений. В таком случае к отрезку $[x_m; x_s]$ присоединяется слева отрезок $[x'_m; x_m)$ шириной l с любыми заданными значениями C . В частности, их можно задать нулевыми для простоты или приближенно равными среднему значению C в пространстве \mathcal{Y} (в случае, когда в нем более одного профиля, — единообразно для всех профилей) для уменьшения искусственно создаваемого размаха значений C^* , ухудшающего аппроксимацию. После этого вычисляются значения \bar{C} по скользящему окну, для чего его центр помещается в точке, начиная с $x = x_m + l/2$ (тогда левый край окна совпадает с x'_m) и кончая $x = x_1 - l/2$ (тогда правый край окна совпадает с x_s).

Как мы уже говорили, \bar{C} может вычисляться различными приемами, позволяющими учесть нефиксированные низкие концентрации; по формуле же (1) после этого можно найти значения C^* в отрезке $[x_m; x_s]$, в которые внесена поправка на усреднение.

Выведем теперь формулу, позволяющую оценивать значения Z по \bar{Z}_l и без знания $Z(x_0)$.

Пусть x_s — точка, находящаяся справа от x_0 на расстоянии, кратном l и $n_s = (x_s - x_0)/l$. Запишем равенство (1) для $i=1, 2, \dots, n_s$. Получим систему из n_s равенств:

$$\left\{ Z(x_0 + i \cdot l) = Z(x_0) + l \cdot \sum_{j=1}^i \frac{\partial \bar{Z}_l(x_0 + (j-1/2) \cdot l)}{\partial x} \right\}_{i=1}^{n_s}. \quad (2)$$

Сложим почленно эти равенства и разделим полученные суммы на n_s :

$$\frac{1}{n_s} \sum_{i=1}^{n_s} Z(x_0 + i \cdot l) = Z(x_0) + \frac{l}{n_s} \sum_{i=1}^{n_s} \sum_{j=1}^i \frac{\partial \bar{Z}_l(x_0 + (j-1/2) \cdot l)}{\partial x}. \quad (3)$$

Разделив и умножив левую часть равенства (3) на l , получаем:

$$\frac{1}{n_s} \sum_{i=1}^{n_s} Z(x_0 + i \cdot l) \cdot l = \frac{1}{n_s \cdot l} \sum_{i=1}^{n_s} Z(x_0 + i \cdot l) \cdot l. \quad (4)$$

Величина $Z(x_0 + i \cdot l) \cdot l$ есть площадь прямоугольника, высота которого равна значению Z в точке $x = x_0 + i \cdot l$, являющейся центром отрезка $[x_0 + i \cdot l - l/2; x_0 + i \cdot l + l/2]$, т. е. сумма, стоящая в правой части равенства (4), есть оценка площади между отрезком $[x_0 + l/2; x_s + l/2]$ оси Ox и кривой $Z(x)$ для этого отрезка. Деление величины этой площади на длину $n_s \cdot l$ названного отрезка дает $\bar{Z}[x_0 + l/2; x_s + l/2]$ — среднее значение $Z(x)$ на указанном отрезке. Следовательно, согласно равенству (4),

$$\frac{1}{n_s} \sum_{i=1}^{n_s} Z(x_0 + i \cdot l) \approx \bar{Z}[x_0 + l/2; x_s + l/2] = \frac{1}{x_s - x_0} \int_{x_0 + l/2}^{x_s + l/2} Z(x) dx. \quad (5)$$

Но интеграл в выражении (5) можно представить в виде:

$$\int_{x_0 + l/2}^{x_s + l/2} Z(x) dx = \sum_{i=1}^{n_s} \int_{x_0 + i \cdot l - l/2}^{x_0 + i \cdot l + l/2} Z(x) dx = \sum_{i=1}^{n_s} \bar{Z}_l(x_0 + i \cdot l) \cdot l. \quad (6)$$

Подставляя это выражение в (5) и учитывая, что $1/(x_s - x_0) = 1/(n_s \cdot l)$, получаем:

$$\frac{1}{n_s} \sum_{i=1}^{n_s} Z(x_0 + i \cdot l) \approx \frac{1}{n_s} \sum_{i=1}^{n_s} \bar{Z}_l(x_0 + i \cdot l). \quad (7)$$

Используя это выражение вместо левой части равенства (3) и решая его относительно $Z(x_0)$, получаем:

$$Z(x_0) \approx \frac{1}{n_s} \left[\sum_{i=1}^{n_s} \bar{Z}_l(x_0 + i \cdot l) - l \cdot \sum_{i=1}^{n_s} \sum_{j=1}^i \frac{\partial \bar{Z}_l(x_0 + (j-1/2) \cdot l)}{\partial x} \right]. \quad (8)$$

Пусть теперь x_m — точка, находящаяся слева от x_0 на расстоянии, кратном l , и $n_m = (x_0 - x_m)/l$. Тогда, аналогично равенству (8), получим:

$$Z(x_0) \approx \frac{1}{n_m} \left[\sum_{i=1}^{n_m} \bar{Z}_l(x_0 - i \cdot l) + l \cdot \sum_{i=1}^{n_m} \sum_{j=1}^i \frac{\partial \bar{Z}_l(x_0 + (j-1/2) \cdot l)}{\partial x} \right]. \quad (9)$$

Приближенность равенств (8) и (9) связана с приближенностью замены среднего из значений Z , выбираемых указанным выше образом

на соответствующей части отрезка $[x_m; x_s]$ средним из значений \bar{Z}_l в тех же точках. В случае (8) это среднее определяется по n_s значениям, а в случае (9) — по n_m значениям. Следовательно, статистический вес q_s выражения (8) пропорционален числу n_s , а выражения (9) — числу n_m :

$$\frac{q_s}{q_m} = \frac{n_s}{n_m}. \quad (10)$$

С другой стороны, по определению статистического веса,

$$q_m + q_s = 1. \quad (11)$$

Решая систему уравнений (10) и (11), получаем:

$$q_m = \frac{n_m}{n_m + n_s}; \quad q_s = \frac{n_s}{n_m + n_s}. \quad (12)$$

Введем эти веса в выражения (8) и (9):

$$Z(x_0) \approx \frac{1}{n_m + n_s} \left\{ \sum_{i=1}^{n_m} \bar{Z}_l(x_0 - i \cdot l) + \sum_{i=1}^{n_s} \bar{Z}_l(x_0 + i \cdot l) + \right. \\ \left. + l \left[\sum_{i=1}^{n_m} \sum_{j=1}^i \frac{\partial \bar{Z}_l(x_0 - (j-1/2) \cdot l)}{\partial x} - \sum_{i=1}^{n_s} \sum_{j=1}^i \frac{\partial \bar{Z}_l(x_0 + (j-1/2) \cdot l)}{\partial x} \right] \right\}. \quad (13)$$

Эта формула дает возможность вычислить величину Z для любой точки x_0 , если известны значения величины \bar{Z}_l и ее производной в указанных здесь точках по одну или по обе стороны.

Заметим, что входящие в формулы (1) и (13) значения производной вычисляются особенно просто, если расстояние между точками x_k постоянно, а число m этих точек, попадающих в скользящее окно, четно (тогда значения \bar{Z}_l задаются для точек, лежащих посередине между соседними точками x_k , а восстановленные значения Z вычисляются для точек x_k).

Действительно, если $Z = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m Z(x_k)$, то при любом виде функции $Z = Z(x)$ результат вычисления \bar{Z}_l не изменится, если эту функцию заменить на ступенчатую, полагая $Z(x) = \text{const} = Z_k$ для всех значений x , входящих в то пространство, которое представляется точкой x_k . Но тогда можно принять, что $\bar{Z}_l = \bar{Z}_l(x)$ — функция, меняющаяся линейно между точками x_k (в этом нетрудно убедиться, перемещая скользящее окно по полю значений ступенчатой функции). В таком случае производная от \bar{Z}_l между точками x_k , вычисляемая для подстановки в равенства (1) или (13) при четном числе m , определяется как разность соответствующих смежных значений $\bar{Z}_l(x)$, деленная на расстояние между точками, к которым они относятся. В связи со сказанным выше, полученные таким образом значения $Z(x_k)$ оказываются правильными при любой фактической форме функции $Z(x)$ (значения же этой функции между точками x_k могут быть оценены с помощью обычной интерполяции).

В остальных случаях, если значения \bar{Z}_l известны только для сети дискретных точек, производные функции $\bar{Z}_l(x)$ в точках, нужных для вычислений, могут быть оценены способами, известными в теории интерполяции. В частности, простейшем случае для этого может быть использован и описанный выше прием, соответствующий линейной интерполяции, но здесь он дает лишь приближенный результат. Более высокая точность достигается путем интерполяции с помощью квадратической или более сложной параболы, проводящейся через соответствующее

число известных значений $\bar{Z}_i(x)$, окружающих точку, в которой должна быть вычислена производная. Для минимизации ошибок следует использовать функцию из класса наиболее близких к действительной, в смысле алгоритма аппроксимации третьего ранга.

Если значения \bar{Z}_i известны для практически непрерывного множества точек (например, в упоминавшейся записи автоматического газоанализатора), то вычисление производной, очевидно, не требует пояснения. Часто в таких случаях его удобно производить графически, по касательным к обрабатываемой кривой.

Напомним, что при правильной (регулярной) сети наблюдений, когда точки x_k находятся в узлах сети, являющихся вершинами одинаковых прямоугольников или параллелепипедов, усреднение по многомерному скользящему окну можно представить как композицию усреднений по одномерным окнам, имеющим размеры и направление соответствующих ребер прямоугольного или параллелепипедального многомерного окна. При этом результаты, полученные усреднением значений в точках, лежащих на линиях, параллельных оси Ox , служат исходными для усреднения по линиям, параллельным оси y , и т. д., причем очередность усреднения безразлична.

Соответственно этому, имея значения \bar{Z}_i в узлах такой прямоугольной или параллелепипедальной сети, мы можем провести описанными выше способами исключение влияния усреднения вначале по линиям, параллельным одной координатной оси; полученные значения принять в качестве исходных для исключения влияния усреднения по другой координатной оси и т. д. При произвольной же сети точек с заданными величинами \bar{Z}_i описанный аппарат дает, разумеется, приближенное восстановление неусредненных значений.

Некоторые аспекты изложенного в этом параграфе материала более подробно и строго освещены в работе (Дубов, 1970₁).

Согласно сказанному в гл. I, решение обратных задач геохимии можно рассматривать как выбор функционала, описывающего воздействие геохимических процессов на геологический объект (искомое исходное пространственное распределение концентраций вещества μ). Для этого используются алгоритмы аппроксимации: такой функционал дает наилучшую (в среднем) аппроксимацию результатов наблюдений. Выбор производится из совокупности возможных выражений. Чтобы получить эту совокупность, необходимо предварительное математическое описание процессов, т. е. решение различных прямых задач, к которым мы и переходим.

Глава IV

РЕШЕНИЕ ПРЯМЫХ ЗАДАЧ

§ 1. ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Геохимическое поле, наблюдаемое при опробовании какой-либо фазы (газа, жидкости или твердой горной породы), можно представить как совокупность действия источников вещества μ , а также направленного и диффузионного (связанного с броуновским движением) переноса частиц, несущих вещество μ .

Действие источников выражается так называемой функцией источников, которая в общем случае имеет вид:

$$g = g(x, y, z; t). \quad (1)$$

Здесь $g(x, y, z; t)$ — количество вещества μ , выделяющееся в расчете на единицу времени и единицу элементарного объема, включающего точку (x, y, z) (точнее, это производная названного количества по времени и объему). Если в точке (x, y, z) в момент t происходит поглощение вещества μ из опробуемой фазы, то величина g отрицательна. Тогда направленный перенос вещества μ описывается известным равенством:

$$dm_1 = U_n \cdot C \cdot dt \cdot dS, \quad (2)$$

где dm_1 — количество вещества μ , проходящее через воображаемую площадку dS за время dt ; U_n — скорость переноса по нормали к этой площадке; C — концентрация вещества μ на площадке dS .

Диффузионный перенос выражается, как известно, уравнением

$$dm_2 = -D \cdot \frac{\partial C}{\partial n} \cdot dS \cdot dt, \quad (3)$$

где dm_2 — количество вещества, проходящее в результате этого пере-

носа через площадку dS за время dt ; n — нормаль к названной площадке; D — коэффициент диффузии частиц, несущих вещество μ .

Путем преобразований, известных в математической физике, из равенств (1), (2), (3) получается одно, эквивалентное их совокупности:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} - U_x C \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} - U_y C \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} - U_z C \right) + g, \quad (4)$$

где U_x, U_y, U_z — составляющие скорости направленного переноса частиц по осям x, y, z .

В совокупности с краевыми (начальными и граничными условиями) уравнение (4) полностью описывает результирующее геохимическое поле. Однако решение этого уравнения традиционными методами при многих краевых условиях трудно или невозможно. Поэтому обычно полагают величины D, U_x, U_y, U_z в рассматриваемой области геологического пространства не зависящими от координат x, y, z .

Тогда уравнение (4) приобретает вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] - U_x \frac{\partial C}{\partial x} - U_y \frac{\partial C}{\partial y} - U_z \frac{\partial C}{\partial z} + g. \quad (5)$$

Но в относительно сложных условиях, с которыми приходится иметь дело поисковой геохимии, решение и этого уравнения традиционными методами оказывается еще слишком сложным для того, чтобы получать нужные нам конкретные аппроксимирующие выражения. Поэтому мы рассмотрим случаи применения этих методов лишь при условиях, когда величины D, U_x, U_y, U_z можно приближенно считать не меняющимися во времени. Кроме того, мы выберем случаи, когда превалирует либо направленное движение частиц, несущих вещество μ , либо диффузионное.

Конкретизируем также функцию g .

При геохимических поисках рудных месторождений по первичным ореолам, как известно, во многих случаях можно считать, что миграция вещества μ , образовавшего ореол, происходила главным образом в газовой или, чаще, в жидкой составляющей горных пород и в водных потоках. Обе эти составляющие мы будем называть подвижной фазой и обозначать через $C_{ж}$ концентрацию вещества μ в ней. Соответственно роли различных факторов в образовании рассматриваемых нами рудных месторождений и их ореолов, чаще всего под $C_{ж}$ мы будем понимать концентрацию вещества μ в жидкой фазе.

Немаловажное значение, как известно, имеет также перемещение вещества в рыхлом состоянии; его мы будем рассматривать особо. В твердой же фазе коренных горных пород вещество μ перемещается настолько медленно, что в нужном нам приближении к действительности этим перемещением можно пренебречь по сравнению с перемещением в подвижной фазе. Поэтому при математическом описании первичных ореолов в первом приближении можно считать, что вещество μ поступает в исследуемую область и перемещается внутри нее, подчиняясь уравнению (5), в жидкой фазе; изменение же концентрации в твердой, неподвижной фазе определяется только функцией g .

Образование многих руд и их первичных ореолов происходит, как известно, в результате взаимодействия подвижной и неподвижной фаз на их границе. Иными словами, частицы, несущие вещество μ , переходят из жидкой или газообразной фазы в твердую, столкнувшись и прореагировав с нею. Этими случаями мы пока и ограничимся (не рассматривая случаев, когда вещество μ переходит в твердую фазу преимущественно при возникновении изолированных центров кристаллизации в жидкой фазе).

Сейчас принято считать, что рудные месторождения многих типов образовались путем выпадения вещества μ из растворов с весьма ма-

лой (далекой от насыщения) концентрацией этого вещества, причем частицы раствора находятся приблизительно в равновесии между собой и реагируют в основном под влиянием окружающей среды. В таком случае мала вероятность того, что частица, несущая вещество μ в жидкой фазе, прореагирует одновременно с поверхностью твердой фазы и с другими частицами, несущими μ в жидкой фазе: более вероятно, что эта частица реагирует только с твердой фазой (возможно, уже измененной реакциями с другими частицами). Согласно известным положениям кинетики химических реакций, такое взаимодействие может быть описано как реакция первого порядка. Вообще говоря, вещество μ может переходить не только из подвижной фазы в неподвижную, но и в обратном направлении. Преимущественным переходом вещества μ из твердой фазы в подвижную объясняются так называемые отрицательные геохимические ореолы. Но для нужной нам иллюстрации принципиальных положений можно ограничиться рассмотрением простейшего случая, когда преобладает необратимый переход вещества μ из подвижной фазы в неподвижную, согласно изотерме Генри.

Связанное с такой реакцией изменение концентрации вещества μ в подвижной фазе, по известным положениям кинетики реакций, выражается равенством:

$$d_t C_{ж} = -\kappa \cdot C_{ж} \cdot dt, \quad (6)$$

где κ — константа скорости реакции.

Поделив выражение (6) на dt , получим, по определению, величину g (учитывая, что здесь концентрация есть производная количества вещества по объему):

$$g = -\kappa C_{ж}. \quad (7)$$

Тогда для случая, когда диффузионным перемещением вещества можно пренебречь по сравнению с направленным переносом, получаем (полагая $D=0$) для подвижной фазы вместо равенства (5) выражение:

$$\frac{\partial C_{ж}}{\partial t} = -U_x \frac{\partial C_{ж}}{\partial x} - U_y \frac{\partial C_{ж}}{\partial y} - U_z \frac{\partial C_{ж}}{\partial z} - \kappa C_{ж}. \quad (8)$$

Если же главную роль играет диффузионный перенос вещества μ , а направленным перемещением можно пренебречь, то, полагая $U_x = U_y = U_z = 0$, вместо равенства (5) получаем выражение:

$$\frac{\partial C_{ж}}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C_{ж}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_{ж}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_{ж}}{\partial z^2} \right) - \kappa C_{ж}. \quad (9)$$

Решая уравнения (8) или (9) с соответствующими краевыми условиями, получим концентрацию $C_{ж} = C_{ж}(x, y, z; t)$ в подвижной фазе в произвольной точке (x, y, z) для произвольного момента времени t . По этой величине нетрудно найти концентрацию $C_{т}$ в твердой фазе на основании следующих положений.

Пусть β — доля объема, занимаемая подвижной фазой в общем объеме изучаемой среды (горной породы), и $1-\beta$ — доля объема, занимаемая твердой фазой. Тогда, согласно определению величины κ , количество элемента, переходящее в твердую фазу из подвижной в единице объема этой среды за время dt , равно

$$dm_{т} = \beta \cdot \kappa \cdot C_{ж} \cdot dt. \quad (10)$$

Разделив это количество на объем твердой фазы, имеющейся в единице объема среды, получим изменение концентрации за время dt в твердой фазе:

$$dC_{т} = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \kappa \cdot C_{ж} \cdot dt. \quad (11)$$

Интегрируя это выражение, получаем, что за время t_k контакта с жидкой фазой концентрация поглощенного из нее вещества μ достигает значения

$$C_T = \int_0^{t_k} \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \kappa \cdot C_{ж} \cdot dt. \quad (12)$$

В некоторых случаях, при изучении направленного переноса, в частности фильтрации, при пренебрежимо малой роли диффузии удобно использовать величину, характеризующую скорость перехода вещества μ в твердую фазу не по времени, а по пройденному пути.

Пусть, как и раньше, $d_t C_{ж}$ — изменение концентрации в некоторой порции подвижной фазы при переходе из нее вещества μ в твердую фазу за время dt ; $d_x C_{ж}$ — изменение величины $C_{ж}$ на пути dx направленного движения подвижной фазы; U — скорость этого движения.

Если $dx = U dt$ — путь, проходимый подвижной фазой за время dt , то $d_t C_{ж} = d_x C_{ж}$. Поэтому мы можем подставить в формулу (6) вместо $d_t C_{ж}$ величину $d_x C_{ж}$, а вместо dt — величину dx/U . В результате получаем:

$$d_x C_{ж} = - \frac{x}{u} \cdot C_{ж} \cdot dx = - \lambda \cdot C_{ж} \cdot dx, \quad (13)$$

где $\lambda = \kappa/U$, т. е.

$$\kappa = \lambda U. \quad (14)$$

Применяя термин, принятый для аналогичных величин в физике, будем называть λ коэффициентом поглощения. Используя выражение (14), можно записать формулу (12) в виде:

$$C_t = \int_0^{t_k} \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \lambda \cdot U \cdot C_{ж} \cdot dt. \quad (15)$$

Зная $C_{ж}$ и C_T , можно найти полную концентрацию вещества μ в горной породе, имеющей твердую и подвижную составляющие:

$$C_{п} = \beta \cdot C_{ж} + (1-\beta) \cdot C_T. \quad (16)$$

Обычно именно эта концентрация определяется в образцах горных пород (исключая объемы крупных полостей). Но в тех случаях, когда известно $\beta C_{ж} \ll (1-\beta) \cdot C_T$ и первым слагаемым в правой части равенства (16) можно пренебречь по сравнению со вторым слагаемым, обычно принимается без оговорок $C_{п} \approx C_T$. В подобных случаях мы будем поступать так же.

При некоторых условиях можно пренебречь обменом веществом μ между разными фазами горных пород. В частности, мы наблюдали рассеяние рыхлых охр в зоне окисления полиметаллических месторождений, когда частицы охр перемещаются по обильным трещинам верхних горизонтов коренных горных пород, без перехода в неподвижную фазу. Широко известно непрерывное хаотическое перемещение частиц гипергенных рыхлых образований, приводящее к образованию рудных ореолов, важных для геохимических поисков (Соловов, 1959).

Во всех этих случаях можно принять $\kappa = 0$, и равенства (8) и (9) дополнительно упрощаются. В частности, для диффузионного процесса мы тогда имеем, вместо уравнения (9):

$$\frac{\partial C_{ж}}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right). \quad (17)$$

Если движение и поглощение частиц μ не зависят от уже созданной концентрации, то концентрация, создаваемая в какой-либо точке

совокупностью процессов и источников, равна сумме концентраций, которые были бы созданы в этой точке каждым из процессов и источников в отдельности. Мы будем ссылаться на это свойство как на свойство аддитивности соответствующих полей.

Любое перемещение частицы можно представить как композицию перемещений в направлениях, параллельных координатным осям, причем результат не зависит от очередности этих перемещений, т. е. названная композиция коммутативна. Преобразование поля концентраций, связанное с процессами переноса, есть результат перемещения частиц. Отсюда следует положение, которое мы сформулируем для удобства использования в следующем виде:

Любое изменение поля значений C в пространстве размерностью N , вызванное только процессами переноса в произвольных направлениях, можно представить в виде коммутативной композиции изменений, вызванных процессами переноса вдоль каждой из N координатных осей.

Свойство, описываемое этим положением, мы будем кратко называть при ссылках свойством композиции процессов переноса.

Рассматриваемые нами процессы вызывают изменения концентраций, накладывающиеся на некоторый фон. При решении прямых задач мы примем его для удобства за начало отсчета, т. е. будем вычислять (иногда без оговорок) только аномальную составляющую, переход от которой к суммарной концентрации производится очевидным образом.

Перейдем теперь к рассмотрению пространственного распределения концентраций в геохимических аномалиях конкретных типов. Вначале рассмотрим некоторые первичные аномалии, а затем — примеры вторичных.

Среди первичных аномалий наибольшее практическое значение сейчас имеют, как известно, фильтрационные и диффузионные. С них мы и начнем рассмотрение.

§ 2. ФИЛЬТРАЦИОННЫЕ АНОМАЛИИ

Пусть U — скорость фильтрации частиц μ . Напомним, что она может быть различной для разных веществ в одном потоке в связи с так называемым фильтрационным эффектом (Коржинский, 1947; Овчинников, Максенов, 1949; Жариков, Дюжикова, Максакова, 1963).

Будем считать, что поток одномерен, и направим ось Ox вдоль него. Концентрацию в жидкой фазе потока в начале координат положим равной некоторой постоянной величине $C_{ож}$. Предположим, что жидкость, являющаяся основой потока, несжимаема и движется с постоянной скоростью, форма полостей в твердой фазе среды неизменна и $\beta = \text{const}(x, t)$. Тогда, несмотря на фильтрационный эффект (если только он неизменен), величина U также не меняется во времени и пространстве (Дубов, 1966₁). Рассмотрим случай со средой, однородной и неоднородной по κ .

Однородная среда

Если $\kappa = \text{const}(x, t) = 0$, то концентрации в жидкой и твердой фазах не меняются с течением времени; этот случай тривиален и не представляет для нас интереса.

Рассмотрим следующий по сложности случай: $\kappa = \text{const}(x, t) \neq 0$ для всех $x, t > 0$.

Исходное выражение для этого случая проще всего получить, интегрируя выражение (13, § 1) по x при начальном условии $C_{ж}(x) = 0$ для всех $x \geq 0$ (соответственно сделанной в § 1 оговорке об уровне отсчета концентраций) и граничном условии $C_{ж}|_{x=0} = C_{ож}$ (соответственно

принятому выше условию о концентрации $C_{ж}$ в начале координат). Тогда получаем:

$$C_{ж}(x) = C_{ож} \cdot e^{-\lambda x}. \quad (1)$$

Выражение (1) отображает и условие на границе, и характер рассматриваемого процесса. Названное условие выражается в виде множителя $C_{ож}$. Поэтому, поделив на него обе части равенства (1), получим выражение, зависящее только от характера процесса:

$$\frac{C_{ж}}{C_{ож}} = e^{-\lambda x}. \quad (2)$$

Изменение концентраций, приближенно соответствующее этому выражению, фиксируется также при некоторой не слишком большой зависимости λ (а следовательно, и λ) от $C_{т}$. Такая закономерность наблюдалась, в частности, при фильтрации флотационных реагентов через дробленые горные породы (Богданов, Поднек и др., 1959).

За время T формирования фильтрационной аномалии первая порция раствора проходит расстояние $l = UT$. Это максимальная возможная протяженность такой аномалии: в точки $x > UT$ раствор еще не поступил, и там заведомо $C_{ж} = C_{т} = 0$. Фактическая протяженность аномалии может быть меньше из-за ограниченности фильтра (например, из-за излияния потока на поверхности земли). В точках $x \leq UT$ внутри фильтра величина $C_{ж}$ больше нуля и, согласно равенству (2), не зависит от времени. Это приводит к характерным кривым концентраций $C_{ж}$ для разных $l = UT$ (на рис. 35 это выражается совпадением обозначений 1, 2, 3 до $x = 8$ усл. ед., причем далее кривая, соответствующая большему значению l , является продолжением той же экспоненты).

Величина $C_{т}$ образуется в точке $x \leq UT$ за время $t_k = T - x/U_{ж}$, в течение которого в этой точке в жидкой фазе поддерживается концентрация, соответствующая формуле (2). Согласно выражению (15, § 1, гл. IV), с учетом формулы (2) получаем:

$$C_{т} = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \lambda \cdot U \cdot C_{ж} \cdot t_k = \frac{\beta}{1-\beta} \lambda U C_{ож} \cdot e^{-\lambda x} \cdot t_k = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \lambda \cdot C_{ож} (UT - x) \cdot e^{-\lambda x}. \quad (3)$$

Или, согласно выражению (1),

$$C_{т} = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \lambda \cdot C_{ж} (UT - x). \quad (4)$$

Полагая $x = 0$, получаем отсюда выражение для концентрации в твердой фазе в начале координат:

$$C_{от} = \frac{\beta}{1-\beta} \lambda C_{ож} \cdot UT = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \lambda \cdot C_{ож} \cdot T. \quad (5)$$

Согласно формулам (3) и (5),

$$C_{т} = C_{от} \cdot e^{-\lambda x} \left(1 - \frac{x}{UT}\right) = C_{от} \cdot e^{-\lambda x} \left(1 - \frac{x}{l}\right), \quad (6)$$

$$\frac{C_{т}}{C_{от}} = e^{-\lambda x} \left(1 - \frac{x}{l}\right). \quad (7)$$

Согласно формуле (3), концентрации в твердой фазе в точках $x < l$ растут со временем, причем этот рост идет тем быстрее, чем меньше x . Поэтому в каждой точке $x < l$ сначала $C_{т} < C_{ж}$, но по прошествии достаточного времени оказывается $C_{т} > C_{ж}$.

Это явление важно для решения давнего спора между сторонниками опробования различных фаз в областях продолжающегося форми-

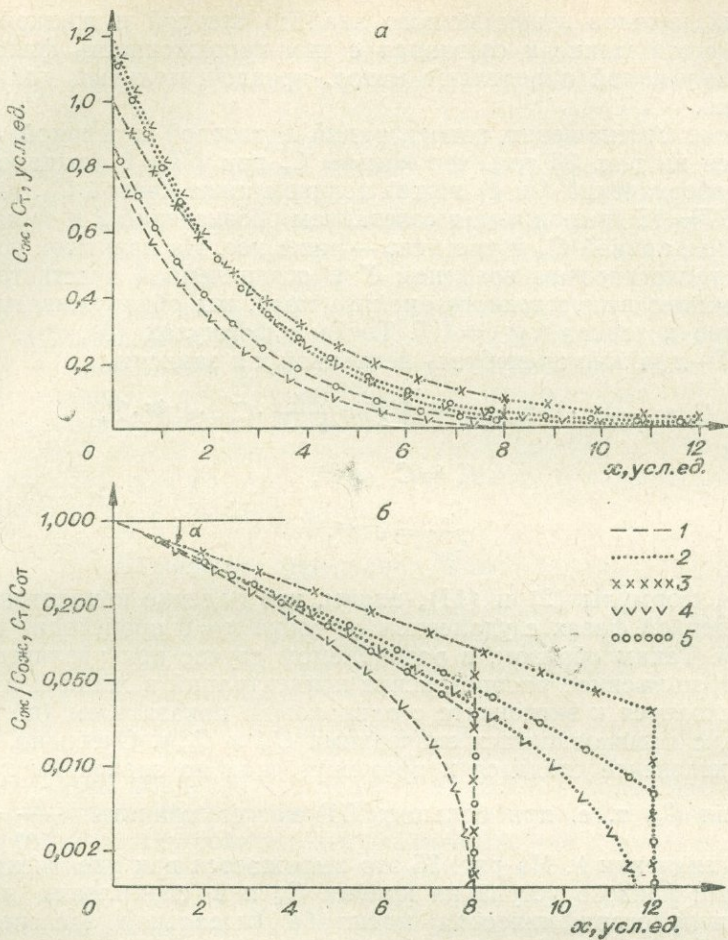


Рис. 35. Теоретические кривые концентраций вдоль однородной зоны фильтрации.

а — кривые C , масштаб арифметический по обеим осям координат; б — кривые C/C_0 , масштаб полулогарифмический (арифметический по оси абсцисс, логарифмический по оси ординат). $C_{ож} = 1$ усл. ед.; $\lambda = 0,3$ усл. ед.; $\beta = 0,25$. Параметры кривых: 1 — $UT = 8$ усл. ед.; 2 — $UT = 12$ усл. ед. Фаза, в которой изучается концентрация: 3 — жидкая, 4 — твердая, 5 — среда (горная порода) в целом.

рования геохимических ореолов (например, около эродлируемых и растворяющихся рудных тел). Поэтому рассмотрим его несколько подробнее.

равной концентрации в жидкой фазе прежде всего в точке $x=0$. Это

Согласно формуле (3), концентрация в твердой фазе становится происходит при $UT = \frac{1-\beta}{\beta\lambda}$, или $T = \frac{1-\beta}{\beta\lambda U}$. При меньших значениях UT или T всюду в ореоле $C_T < C_{ж}$, а при больших — имеется такая точка $x = x_{тж} > 0$, в которой $C_T = C_{ж}$, а левее и правее соответственно $C_T > C_{ж}$ и $C_T < C_{ж}$. Согласно формуле (3), тогда

$$x_{тж} = UT - \frac{1-\beta}{\beta\lambda}. \quad (8)$$

Согласно выражению (8), $dx_{тж}/dT = U$, т. е., появившись в начале координат, точка с равенством $C_T = C_{ж}$ удаляется от него со скоростью U . Аналогично можно найти точку с любым другим соотношением C_T и $C_{ж}$, в том числе с тем, которое характерно для порогов чувствительности

применяемых методов вещественного анализа твердой и жидкой фаз: именно это соотношение и связанная с ним протяженность фиксируемых частей аномалий определяют метод, предпочтительный для поисков аномалий.

Изменение соотношения концентраций в твердой и жидкой фазах отображается на рис. 35 тем, что кривая C_T при $UT=8$ (выражаемая сочетанием обозначений 1 и 4) лежит целиком ниже кривой $C_{ж}$. Кривая же C_T при $UT=12$ (выражаемая сочетанием обозначений 2 и 4) частично лежит выше кривой $C_{ж}$ и частично — ниже нее. На практике, в связи с большим геологическим временем T и ограниченной чувствительностью и точностью вещественного анализа проб, мы обнаруживаем аномалии обычно в точках $x \ll l = UT$. Тогда в формулах (3), (6), (7) в разности $UT-x$ можно пренебречь величиной x и записать:

$$C_T = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \lambda \cdot C_{ож} \cdot e^{-\lambda x} \cdot UT = \frac{\beta \lambda}{1-\beta} \cdot C_{ож} \cdot e^{-\lambda x} \cdot T, \quad (9)$$

или

$$C_T = C_{от} \cdot e^{-\lambda x}, \quad (10)$$

$$\frac{C_T}{C_{от}} = e^{-\lambda x}. \quad (11)$$

Сопоставляя формулы (2) и (11), видим, что падение концентраций в жидкой и твердой фазах с удалением от точки $x=0$ происходит по одному закону. Таким образом, в разбираемом случае при увеличении U или T пространственное распределение концентраций в жидкой и твердой фазах сходится к экспоненте с одинаковым показателем (но, в общем случае, с отличающимися значениями $C_{от}$ и $C_{ож}$). Очевидно, что к такой же экспоненте сходится и промежуточная по значениям полная концентрация $C_{п}$, т. е. при больших UT можно принять $\frac{C_{п}}{C_{оп}} = e^{-\lambda x}$

при том же значении λ . На рис. 35 это выражается при увеличении UT в уменьшении правого уступа на кривых $C_{ж}$ и в спрямлении кривых C_T и $C_{п}$ в полулогарифмическом масштабе (идеальная экспонента в этом масштабе — прямая).

Интегрируя по x выражения для $C_{ж}$ и C_T , можно найти соответствующие продуктивности $Q_{ж}$ и Q_T . Проведем это для случаев больших UT . Тогда можно воспользоваться формулами (1) и (9) с $x \in (0, \infty)$.

$$Q_{ж} = \frac{C_{ож}}{\lambda}; \quad Q_T = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot C_{ож} \cdot UT. \quad (12)$$

Таким образом, продуктивность в жидкой фазе при достаточно большом пути потока в фильтре не может превысить определенной величины, сколько бы ни длился процесс выноса вещества потоком из области $x < 0$. Продуктивность же в твердой фазе растет пропорционально времени. Общая продуктивность выражается очевидным образом:

$$Q_{п} = \beta \cdot Q_{ж} + (1-\beta) Q_T = \beta \left(\frac{1}{\lambda} + UT \right) \cdot C_{ож}.$$

При достаточно больших значениях UT , когда $\frac{1}{\lambda} \ll UT$, можно принять

$$Q_{п} \approx \beta \cdot U \cdot T \cdot C_{ож} = (1-\beta) \cdot Q_T, \quad (13)$$

т. е. тогда количество μ , выносимое из области $x < 0$, определяется практически только количеством, содержащимся в области $x \geq 0$ в твердой фазе.

Такой процесс происходит не только в фильтрах, где жидкая фаза окружена твердой, но и при преимущественно одностороннем их соприкосновении, например, в реках, где происходит обмен веществом между

водой и породам ложа реки (коренными породами и аллювием с некоторым средним значением κ). Возможное уменьшение κ со временем по мере насыщения может лишь увеличивать ту протяженность реки (или фильтра), при которой можно считать, что практически все вещество μ переходит из потока в твердую фазу. Поэтому при $\kappa > 0$ для элементов, поступающих в реки в горных областях и проходящих до океана длинный путь, главную роль при движении в океан играет твердый сток (миграция в океан совместно с поглотившими их частицами твердой фазы, перемещаемыми водой, ветром, силой тяжести и т. д.). Таким образом, оказывается объясненной установленная эмпирически главная роль твердого стока, имеющая большое значение для геохимии (Соловов, 1959) и оспариваемая до сих пор частью геологов на основании интуитивных представлений о растворимости элементов: большая растворимость означает лишь ограничение κ , но не равенство этой величины нулю, что в совокупности с большим значением T (длительности движения к океану) может вызвать почти полный переход μ в твердый сток. Лишь вещества, для которых $\kappa \leq 0$, при любых T должны мигрировать преимущественно в жидкой фазе.

Ступенчато-однородная среда

Ступенчато-однородная среда в нашем случае — это среда, где изменение λ вдоль потока есть ступенчатая функция, т. е. зона фильтрации пересекает однородные области, имеющие различные λ . В остальном сохраняются прежние условия.

Кривая $C_{ж}$, отражающая потерю вещества каждой порцией раствора по мере движения, должна монотонно и непрерывно падать с увеличением x (относительно медленно в породах с малым λ и более быстро в породах с большим λ). Непрерывность этой кривой связана с тем, что, пересекая контакт между областями с различными (но конечными) коэффициентами поглощения, на бесконечно малом расстоянии фильтрующийся поток может потерять лишь бесконечно малое количество вещества. Концентрация же в твердой фазе в соседних точках при одном и том же значении $C_{ж}$ может отличаться, согласно формуле (15, § 1), в любое количество раз соответственно различию в них величин κ и λ .

Помещая начало координат в точку входа фильтрационного потока в первый слой рассматриваемой среды, найдем по формуле (1) распределение $C_{ж}$ в этом слое при $\lambda = \lambda_1$. Величина $C_{ж}$ на выходе из этого слоя дает значение $C_{ож}$ для следующего слоя. Помещая теперь начало координат в точку входа потока во второй слой, по формуле (1) при $\lambda = \lambda_2$ найдем распределение концентраций во втором слое и т. д. Зная величины $C_{ж}$ во всех точках среды и соответствующие им параметры λ , β и UT , найдем по приводившимся формулам значения $C_{т}$. Не выписывая получаемых очевидных, но громоздких

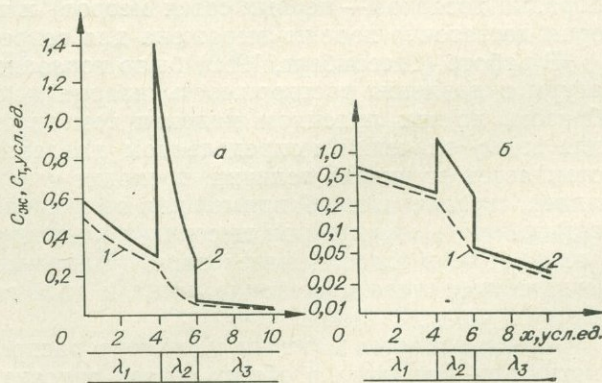


Рис. 36. Теоретические кривые распределения вещества вдоль зоны фильтрации, пересекающей однородные области с различными значениями λ .

а — арифметический масштаб по обеим осям координат; б — полулогарифмический масштаб. $\frac{\beta}{1-\beta} \cdot UT = 4$ усл. ед.; $\lambda_1 = \lambda_3 = 0,3$ усл. ед.; $\lambda_2 = 1,4$ усл. ед. Кривые концентраций: 1 — в жидкой фазе, 2 — в твердой фазе.

выражений, приведем лишь результаты теоретического расчета для довольно типичной картины (рис. 36).

Обратим внимание на то, что в твердой фазе в связи с изменением λ может наблюдаться не только падение, но и повышение концентраций вещества μ вдоль потока с удалением от источника этого вещества.

Среда с переменным коэффициентом поглощения

При изучении геохимических фильтрационных потоков, пересекающих значительный интервал глубин, необходимо считаться с изменением λ вдоль потока в связи с изменением давления и температуры.

Действительно, давление, как известно, существенно влияет на растворимость газов; последние же, в свою очередь, могут влиять на растворимость других веществ (например, выделение углекислого газа может приводить к выпадению из водного раствора карбоната кальция). Непосредственно на растворимость твердых веществ в главном для нас растворителе — воде — давление влияет относительно мало: коэффициент сжимаемости воды $K = \frac{1}{V} \cdot \frac{dV}{dP} = 10^{-5} \div 10^{-6}$ (здесь P — внешнее давление,

V — объем воды), а молекулярное давление в ней, определенное по работе выхода (теплоте испарения), равно примерно 11 000 атм (Телеснин, 1965), т. е. изменение внешнего давления на первые тысячи атмосфер не изменяет существенно внутреннего потенциального поля в воде. Твердые тела еще меньше меняют свое потенциальное поле с изменением давления. Растворимость же определяется только этими полями.

Изменение температуры может существенно сказываться на растворимости всех веществ. Уже одного этого изменения достаточно, чтобы на некоторых глубинах вещество μ , содержащееся в твердой фазе горных пород, преимущественно поступало в поток, а на других глубинах выпадало из него.

Изменение давления и температуры в той части земной коры, где образуются месторождения, в общих чертах известно (Магницкий, 1965; Плющ, 1967; и др.): в областях «нормального» геотермического градиента оно может считаться, в первом приближении, линейным до глубин в первые тысячи метров. Над магматическими очагами оно является более сложным, но, вероятно, и здесь можно принять линейное приближение в интервале глубин, охватываемом одним рудным телом (порядка десятков — первых сотен метров) и той частью его ореола, которая достаточно хорошо выражена для современных наблюдений.

В работе (Штернберг, 1962) было показано, что с изменением температуры и давления растворимость кварца меняется довольно сложным образом, но при линейном падении температуры от сверхкритических (для воды) значений и определенном давлении растворимость вначале повышается от низких величин, проходит через максимум и затем снова падает, стремясь к одной прямой для всех давлений. Относительно малая растворимость кварца при высоких температурах объясняется преобладанием воды в газовой фазе (пара). Давление меняет долю этой фазы. Когда температура достаточно низка и доля газовой фазы мала, уменьшается и роль давления.

Кварц является важным и широко распространенным компонентом многих руд. Вероятно, в общих чертах описанная зависимость растворимости от температуры и давления характерна и для некоторых других рудообразующих веществ. Сходимость кривых растворимости к одной прямой означает, что в области этой сходимости изменение растворимости в зависимости от температуры можно считать приближенно линейным. Падение растворимости в этой области с уменьшением температуры означает соответствующий рост λ . Таким образом, для интересующих нас интервалов глубин в первом приближении можно принять изменение

давления и температуры линейным в зависимости от глубины, а изменение κ — линейным в зависимости от давления и температуры, т. е. в результате и величина κ может быть представлена как линейная функция глубины. Это означает, что для потока, направленного из глубины земли к ее поверхности, в первом приближении можно принять

$$\kappa = G \cdot (x - x_{ин}), \quad (14)$$

где $G = \frac{\partial \kappa}{\partial x} = \text{const} > 0$ — градиент величины κ в области $x > x_{ин}$, $x_{ин}$ — точка инверсии — такая точка, ниже которой температура, давление и другие параметры обуславливают возможность преимущественного перехода μ из твердой фазы в жидкую, а выше, наоборот, μ преимущественно поглощается твердой фазой; ось Ox направлена вдоль потока, в сторону уменьшения температуры.

Выражение (14) мы и используем для приближенного анализа выпадения материала из горячих растворов — гидротерм, поднимающихся из глубин Земли. Соответственно условиям аппроксимации мы должны получить формулы, дающие хорошее количественное приближение к действительности лишь в определенных, соответствующих им случаях. Но выявляемые при этом принципиальные тенденции в изменении геохимического поля с изменением κ должны быть справедливы и для других случаев, согласно общим свойствам линейной аппроксимации.

При $U = \text{const}$ из равенства (14) следует, что

$$\lambda = Y(x - x_{ин}), \quad (15)$$

где $Y = \frac{\partial \lambda}{\partial x} = \frac{G}{U} = \text{const}$ — градиент величины λ . Тогда приводившееся общее равенство $dC_{ж} = -\lambda \cdot C_{ж} \cdot dx$ может быть записано в виде:

$$dC_{ж} = -Y(x - x_{ин}) \cdot C_{ж} \cdot dx. \quad (16)$$

Обозначим через $C_{инж}$ величину $C_{ж}$ в точке инверсии и примем ее постоянной. Тогда, интегрируя равенство (16) при граничном условии $C_{ж}(x_{ин}) = C_{инж}$, получаем:

$$C_{ж} = C_{инж} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot Y \cdot (x - x_{ин})^2\right), \quad (17)$$

$$\frac{C_{ж}}{C_{инж}} = \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot Y \cdot (x - x_{ин})^2\right). \quad (18)$$

Подставляя выражения (17) и (14) в общее выражение (11, § 1) для $dC_{т}$, получаем:

$$dC_{т} = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot G \cdot C_{инж} \cdot (x - x_{ин}) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot Y \cdot (x - x_{ин})^2\right) \cdot dt. \quad (19)$$

В точках $x = x_{ин}$ и $x = \infty$ значение $C_{т}$ остается равным начальной (фоновой) величине, которая, как было условлено, принимается за начало отсчета, т. е. за нуль. Следовательно, здесь имеются краевые условия $C_{т}(x, t)|_{t=0} = 0$ для всех $x \geq x_{ин}$ и $C_{т}(x, t)|_{x=\infty} = 0$ для всех $t \geq 0$. Интегрируя по времени выражение (19) при этих краевых условиях, получаем:

$$C_{т} = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot G \cdot C_{инж} (x - x_{ин}) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot Y (x - x_{ин})^2\right) \cdot t_k, \quad (20)$$

где, как и ранее, $t_k = T - x/U$.

Согласно формулам (17) и (20), $C_{ж}$ монотонно убывает с увеличением x после точки $x_{ин}$, величина же $C_{т}$ растет от нуля до некоторого максимума, а затем снижается асимптотически вновь до нуля.

На основании тех же соображений, которые приводились в предыдущем параграфе, здесь обычно можно принять $x \ll UT$, т. е. $x/U \ll T$. Тогда можно приближенно считать $t_h = T$, и формула (20) упрощается:

$$C_T = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot G \cdot C_{\text{пж}} \cdot (x - x_{\text{п}}) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot Y \cdot (x - x_{\text{п}})^2\right) \cdot T. \quad (21)$$

Приравнивая нулю производную по x от этого выражения, найдем положение максимума концентрации в твердой фазе:

$$x_{\text{ст}} = \frac{1}{\sqrt{Y}} + x_{\text{п}}. \quad (22)$$

Подставляя это выражение в (21), получим максимальное значение величины C_T :

$$C_{T_s} = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \frac{G}{\sqrt{Y}} \cdot C_{\text{пж}} \cdot e^{-1/2} \cdot T = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \frac{G}{\sqrt{e \cdot Y}} \cdot C_{\text{пж}} \cdot T. \quad (23)$$

Деля (21) на (23), найдем:

$$\frac{C_T}{C_{T_s}} = \sqrt{eY} \cdot (x - x_{\text{п}}) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot Y \cdot (x - x_{\text{п}})^2\right), \quad (24)$$

$$C_T = \sqrt{e \cdot Y} \cdot C_{T_s} \cdot (x - x_{\text{п}}) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot Y \cdot (x - x_{\text{п}})^2\right). \quad (25)$$

Формулы (18) и (24) дают возможность получить наглядное представление об изменениях формы распределения концентраций. Напомним, что при фоновой концентрации $C_{\text{ф}} \neq 0$ необходимо вводить поправку, тогда формула (24) дает не C_T/C_{T_s} , а $\gamma_a = (C_T - C_{\text{ф}})/(C_{T_s} - C_{\text{ф}})$. На рис. 37 показаны примеры таких кривых для различных $x_{\text{п}}$ и Y .

Как указывалось перед выводом этих формул, они могут соблюдаться количественно в определенном ограниченном числе случаев, но выражаемые ими тенденции должны быть справедливы в широком круге условий. Используем это.

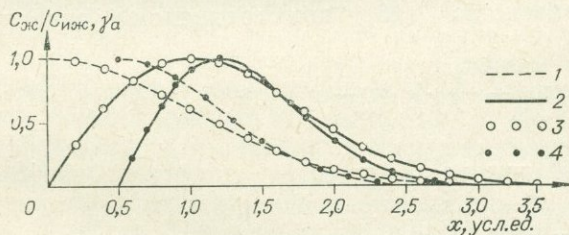


Рис. 37. Теоретические кривые концентраций вдоль фильтрационного потока при $\lambda = Y(x - x_{\text{п}})$, $Y = \text{const}(x)$.

1 — жидкая фаза; 2 — твердая фаза; 3 — $x_{\text{п}} = 0$, $Y = 1$ усл. ед.; 4 — $x_{\text{п}} = 0,5$ усл. ед., $Y = 2$ усл. ед.

Согласно выражению (22), при увеличении градиента температур точка $x_{\text{ст}}$ должна приближаться к $x_{\text{п}}$, т. е. максимум оруденения смещается в область относительно высоких температур. Заметим, что это объясняет известный сдвиг процессов рудообразования в область повышенных температур у эпitherмальных месторождений, формировавшихся в близповерхностных условиях, где изменение температуры с глубиной относительно велико.

Согласно выражению (23), при росте градиента температур ускоряется рост величины C_{T_s} . При ограниченном сечении зоны фильтрации и возможности перекрытия ее рудоносным материалом это означает, что в геосинклинальных областях с высокими значениями градиентов температур и близ локальных интрузий относительно часто должны встречаться богатые рудные тела с малой протяженностью по падению. В областях же, где градиенты температур ниже, рудные тела должны встречаться относительно редко, но иметь большие средние размеры. Это объясняет ряд фактов (например, в отношении крупных полиметалли-

ческих месторождений в платформенных областях Америки и Северо-Западной Европы) и согласуется с результатами экспериментов (Хелгсон, 1967).

При движении гидротермальных растворов из области с относительно высокой температурой в область более низких температур внутри потока устанавливается некоторый градиент температур. При прочих равных условиях абсолютная величина этого градиента тем меньше, чем больше масса, переносимая потоком через поперечное сечение в единицу времени. В свою очередь, эта масса пропорциональна площади сечения потока и его скорости. При определенном перепаде давлений скорость потока также тем больше, чем больше площадь его сечения, т. е. меньше сопротивление потоку. Согласно описанным зависимостям между величиной κ и температурой, а также между величиной $\kappa_{ст}$ и градиентом κ , это означает, что в относительно широких и протяженных зонах тектонических разломов максимум оруденения должен находиться выше, чем в оперяющих их трещинах.

Вообще говоря, зависимость $\kappa = \kappa(x)$ может быть весьма сложной. Аппроксимируя ее мысленно ломаной линией, состоящей из прямолинейных отрезков с разными значениями G , на основании выведенных закономерностей можно видеть, что при увеличении G вдоль рудоносного потока может образоваться цепочка рудных максимумов. Это означает, что в едином процессе рудообразования, без существенного изменения условий во времени, могут возникнуть рудные тела и аномалии концентраций (ореолы) различных элементов на разных горизонтах.

Из изложенного выше следует, что рудные тела должны образовываться всюду, где имеются потоки подвижной фазы (растворителя), движущиеся в направлении возрастания κ , если эти потоки пересекают достаточно большой диапазон глубин, содержащий κ_n , и если в горных породах ниже точки инверсии имеется μ в растворимом виде. Достаточный для этого, отличный от нуля геотермический градиент имеется практически везде.

Увеличение градиента температур, вызываемое внедряющимися в земную кору порциями горячей магмы, интенсифицирует такой процесс рудообразования. Если же магма является источником μ , то, естественно, руды могут возникнуть и при отсутствии существенных количеств μ в породах, пересекаемых потоком растворителя.

При внедрении интрузива окружающие его породы вначале прогреваются как в результате теплопроводности неподвижной фазы, так и в связи с возникающим конвекционным потоком газовой-жидкой фазы. Этот поток обязательно возникает в связи с расширением при нагревании воды и газов, заполняющих поры и трещины горных пород, а также в связи с уменьшением плотности нагреваемой воды.

Поэтому вначале точки инверсии различных веществ движутся вверх. Если в проходимых потоком породах имеется какой-то элемент в растворимой форме, то ниже этих точек он переходит в раствор, образуя вокруг потока отрицательный ореол.

Но через некоторое время в связи с остыванием интрузива количество получаемого от него в единицу времени тепла перестает компенсировать отдачу его близлежащими горными породами в окружающее пространство. Поэтому они также начинают охлаждаться. Тогда точки инверсии движутся вниз, и если источник μ еще не иссяк, а канал не перекрыт, то на отрицательные ореолы должны накладываться положительные аномалии, на сравнительно высокотемпературную минерализацию должна накладываться сравнительно низкотемпературная и т. д. Иными словами, должно наблюдаться известное по фактам явление, носящее название телескопирования. При этом на фоне понижения концентраций μ , образовавшегося в период подъема точки инверсии, нередко можно наблюдать повышение, возникшее после опускания точки инверсии (рис. 38, 39).

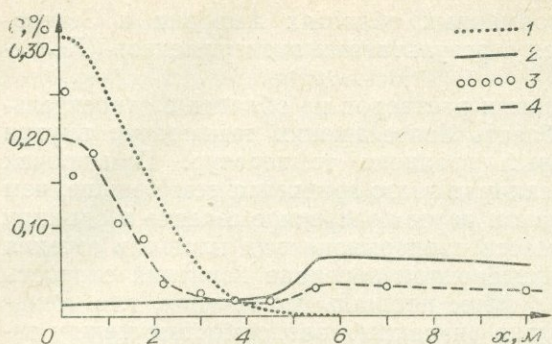


Рис. 38. Распределение концентраций вольфрама в ореолах кварц-вольфрамитовых жил (месторождение Дедова гора, Забайкалье, данные автора). Масштаб арифметический.

1 — сглаженный график концентраций в положительном ореоле близ одной из жил; 2 — сглаженный график концентраций в отрицательном ореоле близ одной из жил; 3, 4 — величины средних концентраций и сглаженный график по результатам опробования гранитов возле 5 кварц-вольфрамитовых жил одного месторождения, в примерно одинаковых геологических условиях; x — расстояние от зальбандов жил.

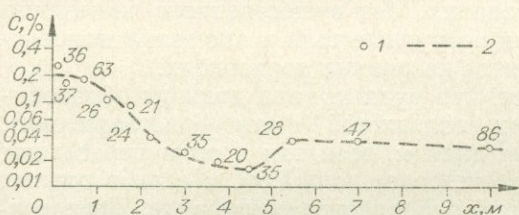


Рис. 39. Усредненное распределение концентраций вольфрама в ореолах пяти кварц-вольфрамитовых жил (месторождение Дедова гора, Забайкалье, данные автора). Масштаб полулогарифмический.

1 — концентрации по данным спектрального анализа, цифрами обозначено число проб, по которым произведено усреднение концентраций; 2 — сглаженная кривая концентраций; x — расстояние от зальбандов жил.

x_1) находится то количество вещества, которое принесено жидкой фазой за время t :

$$Q_{\text{п}} = \beta \cdot C_{\text{ож}} \cdot x_1 + (1 - \beta) \cdot C_{\text{т}} \cdot x_1 \approx \beta \cdot C_{\text{ож}} \cdot U \cdot t, \quad (26)$$

(слагаемое $\beta \cdot C_{\text{ож}} \cdot x_1$ отражает количество μ в жидкой фазе между точками 0 и x_1 потока, так как в пределах зоны насыщения $C_{\text{ж}} = \text{const} (x) = C_{\text{ож}}$). Согласно (26),

$$x_1 = \frac{\beta \cdot C_{\text{ож}} \cdot U t}{\beta \cdot C_{\text{ож}} + (1 - \beta) \cdot C_{\text{т}}}. \quad (27)$$

Скорость перемещения этой границы равна:

$$\frac{\partial x_1}{\partial t} = \frac{\beta \cdot C_{\text{ож}} \cdot U}{\beta \cdot C_{\text{ож}} + (1 - \beta) \cdot C_{\text{т}}}. \quad (28)$$

Выражение (28) строго справедливо для постоянных $C_{\text{ож}}$ и U и приближенно — для некоторых средних их значений, если эти величины непостоянны. Но сам факт образования резких границ зон с различными $C_{\text{т}}$ в результате описанного процесса должен быть при любых изменениях $C_{\text{ож}}$ и U .

Образование зон с резкими границами. Выше мы рассмотрели случаи, когда константа скорости реакции перехода вещества μ из подвижной фазы в твердую не менялась в изучаемом процессе. Теперь рассмотрим другой крайний случай: предположим, что до достижения некоторой концентрации $C_{\text{тн}}$ величина μ велика и там, где $C_{\text{т}} < C_{\text{тн}}$, вещество μ практически полностью переходит из подвижной фазы в неподвижную. Если же концентрация вещества μ в твердой фазе достигает величины $C_{\text{тн}}$, то такой переход прекращается, т. е. $C_{\text{тн}}$ — концентрация насыщения.

В таком случае фильтрационный поток не может перенести существенное количество вещества μ на расстояние x , пока в предшествующих точках не достигнуто насыщение. Следовательно, в рассматриваемой среде образуется зона насыщения, расширяющаяся по мере притока вещества μ .

Выведем формулу для скорости перемещения границы зоны насыщения.

Пусть x_1 — положение границы зоны насыщения в момент t . В интервале (0; x_1)

В действительности λ может изменяться с насыщением постепенно. Нетрудно видеть, что в зависимости от характера этого изменения границы между рассматриваемыми зонами должны иметь различную резкость, что и наблюдается в природе. Если поглощение μ обусловлено химическими реакциями самого скелета горной породы, то такие зоны соответствуют широко известным в геологии зонам метасоматоза.

Поскольку при разных соотношениях концентраций реагирующих элементов μ преимущественными могут быть разные реакции, с разными κ , то в направлении падения величины $C_{ж}$ вдоль потока в результате описанного процесса зоны одного состава могут сменяться другими.

§ 3. ДИФФУЗИОННЫЕ АНОМАЛИИ

Непоглощающая среда

При изучении диффузионных полей, в отличие от рассмотренных выше фильтрационных, условие $\kappa=0$ не является тривиальным: и при этом условии диффузионное поле может меняться сложным образом.

Поэтому рассмотрим случай, когда в пространстве V , где протекает изучаемый процесс, обмен веществом μ между различными фазами отсутствует ($\kappa=0$) при $D=\text{const}$. Этому случаю соответствует уравнение (17, § 1). Решим его вначале для одномерного варианта, когда диффузия проходит только вдоль оси x и $\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = 0$, $\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = 0$. Тогда вместо равенства (17, § 1) можно написать: $\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$. В качестве краевого условия примем $C(x)|_{t=0} = C_0(\xi)$ для всех $x = \xi \in (-\infty, \infty)$, где $C_0(\xi)$ — произвольная возможная функция распределения концентраций по точкам ξ исходного поля. (В связи с бесконечностью пространства V и отсутствием у него границ граничное условие в обычном виде здесь не вводится.) Согласно известным положениям математической физики (Смирнов, 1957; Рябов, 1957; Лыков, 1967), общее решение в таком случае имеет вид:

$$C(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot \sigma_D}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} C_0(\xi) \cdot \exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{(2\sigma_D^2)}\right) \cdot d\xi, \quad (1)$$

где $\sigma_D = \sqrt{2Dt}$.

Аналогично, полагая в равенстве (17, § 1) $\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = 0$, а остальные производные отличными от нуля, получим уравнение

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right)$$

для двумерной диффузии. В качестве краевого условия примем $C(x, y)|_{t=0} = C_0(\xi, \eta)$ для всех $x = \xi \in (-\infty; \infty)$, $y = \eta \in (-\infty, \infty)$. Тогда

$$C(x, y) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi \cdot \sigma_D})^2} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} C_0(\xi, \eta) \cdot \exp\left(-\frac{((x-\xi)^2 + (y-\eta)^2)}{(2\sigma_D^2)}\right) d\xi \cdot d\eta. \quad (2)$$

Для трехмерной диффузии уравнение (17, § 1) применимо непосредственно, и, по аналогии с предшествующими вариантами, следует ввести лишь краевое условие $C(x, y, z)|_{t=0} = C_0(\xi, \eta, \zeta)$ для всех $x = \xi \in (-\infty;$

∞), $y = \eta \in (-\infty; \infty)$, $Z = \zeta \in (-\infty; \infty)$. Тогда

$$C(x, y, z) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_D)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} C_0(\xi, \eta, \zeta) \cdot \exp(-((x-\xi)^2 + (y-\eta)^2 + (z-\zeta)^2)/(2\sigma_D^2)) \cdot d\xi \cdot d\eta \cdot d\zeta. \quad (3)$$

Выражения (1), (2), (3) можно объединить в одно. Для этого используем общее векторное обозначение ρ для точки исходного поля и r для точки наблюдаемого поля. Тогда краевые условия, при которых получены эти выражения, примут вид: $C(r)|_{t=0} = C_0(\rho)$ для всех $r = \rho \in V$, где V — неограниченное пространство. При этих обозначениях все формулы (1), (2), (3) записываются так:

$$C(r) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi} \cdot \sigma)^N} \int_V C_0(\rho) \exp(-|r-\rho|^2/(2\sigma_D^2)) \cdot dV,$$

где N — размерность пространства V .

Рассмотрим теперь диффузионные поля концентраций при некоторых геологически важных частных выражениях поставленных выше краевых условий.

Одномерная диффузия. 1. Пусть $C_0(\xi) = \text{const}(\xi) = C_p$ при $\xi \in (-\infty; 0)$ и $C(\xi) = 0$ при $\xi \in (0; \infty)$. Это означает, что мы будем исследовать диффузионное рассеяние тела, которое в момент $t=0$ простирается от начала оси абсцисс в отрицательную бесконечность*.

Геологически такая ситуация возникает, например, при изучении диффузии частиц, несущих вещество μ , в районе контакта двух однородных горных пород, если в области исследований на больших (по сравнению с σ) расстояниях контакт может быть аппроксимирован плоскостью. Соответственно поставленному общему условию исследование здесь ведется для случая, когда коэффициент диффузии может быть принят одинаковым для всего пространства.

При указанном физическом ограничении, согласно известным формулам (Смирнов, 1957; Jost, 1952; Болтакс, 1961; и др.), равенство (1) сводится к выражению:

$$C(x) = \frac{1}{2} C_p \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sigma_D}\right) \right], \quad (4)$$

где Φ — символ интеграла вероятностей, определяемого формулой (57, § 2, гл. II).

Для решения обратной задачи важно, что здесь максимальная концентрация C_s в аномалии равна величине C_p , причем $C(x) \rightarrow C_s = C_p$ при $x \rightarrow -\infty$ и $C(0) = \text{const}(Dt) = \frac{1}{2} C_p$ (при любом $\sigma = \sqrt{2Dt}$, согласно формуле (4), при $x=0$ значение $C(x)$ равно половине величины C_p).

На рис. 40 показаны кривые $C/C_s = C/C_p$, соответствующие формуле (4).

В правой части формулы (4) величина x обозначает расстояние от точки наблюдения до границы рассеивающегося тела. Если эта граница пересекает ось Ox не в нулевой точке, а в точке x_1 , то в правой части формулы (4) вместо x нужно подставить $x - x_1$. Тогда имеем:

$$C(x) = \frac{1}{2} C_p \left[1 - \Phi\left(\frac{x-x_1}{\sigma_D}\right) \right]. \quad (5)$$

2. Пусть $C(\xi) = \text{const}(\xi) = C_p$ при $\xi \in (-p_x; +p_x)$ и $C(\xi) = 0$ при остальных ξ (к этому случаю относится рассеяние перпендикулярного

* Пространство точек с абсциссами x от 0 до ∞ или от 0 до $-\infty$ иногда будем называть для краткости полупространством (по примеру геофизики).

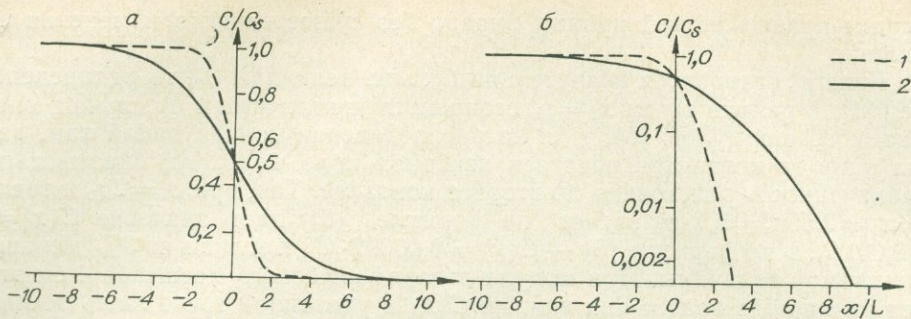


Рис. 40. Распределение концентраций в диффузионном ореоле рассеяния полу-бесконечного тела.

a — арифметический масштаб; *b* — полулогарифмический масштаб. *L* — условная единица расстояния; *x* — расстояние от контакта в усл. ед. 1 — $\sigma_D = 1$ усл. ед.; 2 — $\sigma_D = 3$ усл. ед.

оси *Ox* пласта (или жилы) бесконечной протяженности мощностью $2p_x$. Тогда равенство (1) принимает вид:

$$C(x) = \frac{1}{2} C_p \left[\Phi \left(\frac{p_x + x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_x - x}{\sigma_D} \right) \right]. \quad (6)$$

Полагая $x=0$, находим из (6):

$$C_s = C_p \cdot \Phi \left(\frac{p_x}{\sigma_D} \right), \quad C_p = \frac{C_s}{\Phi \left(\frac{p_x}{\sigma_D} \right)}. \quad (7)$$

Тогда вместо (6) можно написать:

$$C(x) = \frac{1}{2} \cdot \frac{C_s}{\Phi \left(\frac{p_x}{\sigma_D} \right)} \left[\Phi \left(\frac{p_x + x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_x - x}{\sigma_D} \right) \right] \quad (8)$$

(эта формула важна для решения обратной задачи, когда C_p неизвестно). Соответствующие этой формуле правые части симметричных кривых C/C_s показаны на рис. 41.

Характерно, что в изображении этих кривых в полулогарифмическом масштабе изменение σ сказывается главным образом на наклоне кривых, так как с увеличением σ кривые растягиваются по оси абсцисс, их наклон уменьшается. Увеличение же p_x заметно расширяет верхние части кривых, в результате чего происходит смещение изображенных на

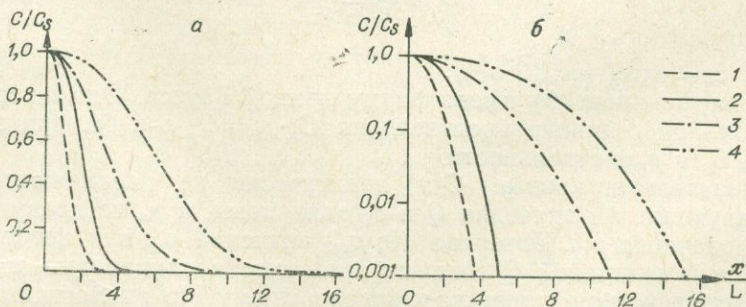


Рис. 41. Распределение концентраций в диффузионном ореоле рассеяния пласта. Правые ветви кривых.

a — арифметический масштаб; *b* — полулогарифмический масштаб. *L* — условная единица расстояния; *x* — расстояние от осевой плоскости пласта. 1 — $p \leq 0,25 \sigma_D$, $\sigma_D = 1$ усл. ед.; 2 — $p = 2 \sigma_D$, $\sigma_D = 1$ усл. ед.; 3 — $p \leq 0,25 \sigma_D$, $\sigma_D = 3$ усл. ед.; 4 — $p = 2 \sigma_D$, $\sigma_D = 3$ усл. ед.

рисунке правых ветвей кривых вправо без существенного изменения их наклона.

Если p_x становится значительно больше величины σ_D , то распределение C/C_s в районе точки $x_1 = p_x$ становится неотличимым от случая, описываемого формулой (5), т. е. на распределении концентраций там, где был один из контактов пласта в исходном поле, перестает сказываться ограниченность расстояния до второго контакта. Так, при $p_x = 2\sigma_D$ в точке $x = x_1 = 2,55p_x = 5,1 \cdot \sigma_D$ расчет по формуле (8) дает значение $C(x) = 0,001C_s$, а по формуле (5) — $C(x) = 0,00097 \cdot C_s$, т. е. лишь на 3% меньше измеряемой величины. При модуле логарифмического масштаба 4 см это дает различие в положении кривых $C(x)$ в указанной точке лишь немногим больше 0,5 мм (это важно для решения обратной задачи). В точке $x=0$, где, согласно формуле (8), должно быть $C(x) = C_s$, формула (5) дает при вышеуказанном значении x_1 величину $C(x) = 0,997 C_s$, т. е. примерно на 0,3% меньше. В точках, промежуточных между двумя указанными, различия результатов вычислений по формулам (5) и (8) при названной величине p_x также невелики.

Точка, в которой $C(x)/C_s = 1/2$, согласно формулам (4) и (5), лежит там, где в исходном поле находится граница сред (контакт пород); согласно формуле (8), точка с таким соотношением концентраций лежит на расстоянии $0,03 p_x$ от контакта пласта (во вмещающей его среде). Наконец, в случае, описываемом формулой (5), $C_p = C_s$, а формула (8) при $p_x = 2\sigma_D$ дает $C_p = 1,05 \cdot C_s$, т. е. лишь на 5% выше.

При дальнейшем увеличении p_x/σ_D различия становятся еще меньше.

При уменьшении p_x кривые C/C_s сжимаются по оси абсцисс до предела, определяемого только величиной σ_D . Действительно, согласно теореме о среднем, при поставленных краевых условиях ($C(\xi) = C_p$ при $\xi \in (-p_x; +p_x)$ и $C(\xi) = 0$ при остальных ξ), полагая $p_x \rightarrow 0$, получаем из формулы (1):

$$C(x) = \frac{2C_p \cdot p_x}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_D} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_D^2}\right) \quad (9)$$

или

$$C(x) = C_s \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_D^2}\right), \quad (10)$$

где

$$C_s = \frac{2C_p \cdot p_x}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_D}, \quad (11)$$

то есть $C/C_s = \exp(-x^2/(2\sigma_D^2))$.

Кривая функции (9) имеет форму кривой Гаусса. Она не меняется при постоянной величине произведения $C_p \cdot p_x = Q$, как бы при этом ни менялись C_p и p_x в отдельности.

Следовательно, кривые $C(x)$ практически не различаются, если соответствующие им значения Q и σ_D одинаковы, а p_x не превышает некоторого значения p_{x0} . Интервал (0; p_{x0}) значений p_x , при которых тела с одинаковой величиной Q создают практически одинаковые аномалии, есть область действия принципа эквивалентности. На аналогичный принцип было ранее обращено внимание в геофизике. В геохимии существование такой области предполагал А. П. Соловов (1959), величина же p_{x0} была оценена в работе (Дубов, 1963₂). Опишем эту область подробнее.

При $p_x \leq 0,25\sigma_D$ величины $C(x)$, вычисленные по формуле (8), отличаются от вычисленных по формуле (10) для интервала (C_s ; $0,001C_s$)

в пределах лишь нескольких относительных процентов. В точке $x=0$ уже при $p_x=0,25\sigma_D$ расхождение уменьшается практически до нуля. В области значений x , где $C(x) < 0,001 C_s$, названное относительное расхождение существенно возрастает, но эта область практически обычно не учитывается при анализе геохимических полей, так как в ней величины $C(x)$ часто малы по сравнению с порогом чувствительности вещественного анализа проб и интенсивностью аддитивных помех. Поэтому при современных требованиях к точности построений интервал $p_x \in (0; 0,25 \sigma_D)$ ориентировочно можно считать областью действия принципа эквивалентности. В области значений x , где $C(x) \in (C_s; 0,001 C_s)$, при модуле логарифмического масштаба 4 см (по оси концентраций) различия кривых C/C_s при $p_x \leq 0,25\sigma_D$ лежат в пределах графической погрешности.

Аналогично переходу от формулы (4) к формуле (5), можно получить формулу для случая, когда осевая плоскость рассеивающегося пластообразного тела пересекает координатную ось не в точке $x=0$, а в любой другой.

3. Пусть $C(\xi) = \text{const}(\xi) = C_{p1}$ при $\xi \in (x_1 - p_1; x_1 + p_1)$, $C(\xi) = \text{const}(\xi) = C_{p2}$ при $\xi \in (x_2 - p_2; x_2 + p_2)$ и $C(\xi) = 0$ при остальных ξ . Это начальное распределение и геологически отображается как два параллельных между собой и перпендикулярных оси Ox пласта бесконечной протяженности, мощностью соответственно $2p_1$ и $2p_2$, пересекающих ось Ox в точках x_1 и x_2 . Такое распределение является суммой распределений, описываемых формулой (6), с учетом вышеуказанного преобразования, связанного с пересечением оси Ox осевой плоскостью пласта не в начале координат. Нетрудно видеть, что в этом случае

$$C(x) = \frac{1}{2} C_{p1} \left[\Phi \left(\frac{p_1 - x_1 + x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_1 + x_1 - x}{\sigma_D} \right) \right] + \frac{1}{2} C_{p2} \left[\Phi \left(\frac{p_2 - x_2 + x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_2 + x_2 - x}{\sigma_D} \right) \right]. \quad (12)$$

С помощью этой формулы можно оценить разрешающую способность метода исследований по ореолам при разных величинах $p_1, p_2, \sigma, x_2 - x_1$.

Для случая $C_{p1} = C_{p2} = C, p_1 = p_2 = 0,1 \sigma_D$ при разных $x_1 - x_2$ на рис. 42 показаны правые части симметричных кривых C/C_p . При $x_2 - x_1 \geq 8\sigma_D$ в районах точек x_1 и x_2 концентрации практически не отличаются от тех, которые выражаются формулой (6) для отдельных пластов. Даже в точке $x = \frac{x_1 + x_2}{2}$ (посередине меж-

ду пластами), где отличие наиболее велико, при $x_2 - x_1 = 8\sigma_D$ формула (12) дает лишь $C(x) = 0,0006 C_s$ вместо значения $C(x) = 0,0003 C_s$, которое было бы при наличии только одного пласта и вычисления по формуле (6).

При сближении названных зон максимумы $C(x)$ смещаются от точек x_1 и x_2 внутрь интервала $(x_1; x_2)$. Так, при $x_2 - x_1 = 2,8\sigma_D$ расстояние между максимумами составляет $2,7\sigma_D$, при $x_2 - x_1 = 2,5\sigma_D$ это расстояние сокращается до $2,2\sigma_D$, а при $x_2 - x_1 \leq 2\sigma_D$ два ореола уже сливаются в один с максимумом над серединой промежутка между ними.

4. Пусть $C(\xi) = 0$ при $\xi \in (-p_x; +p_x)$ и $C(\xi) = \text{const}(\xi) = C_p$ при ос-

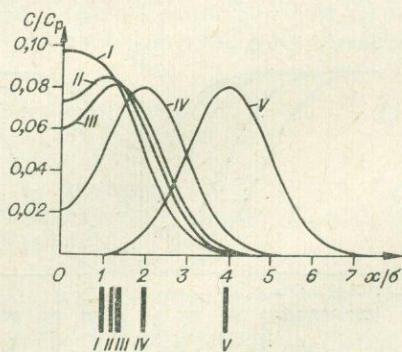


Рис. 42. Ореол диффузионного рассеяния двух параллельных пластов малой мощности при разных расстояниях между ними (диффузия без поглощения). Правые части кривых.

I-V — положения правого пласта (в разрезе) и соответствующие им кривые концентраций после рассеяния. Левая часть симметрична относительно оси ординат.

гальных ξ . Геологически это может быть представлено как промежуток между двумя полубесконечными телами μ (перерыв в оруденении).

Примем C_p за начало отсчета концентрации C' . Тогда поставленное условие выразится в виде: $C'(\xi) = -C_p$ при $\xi \in (-p_x; +p_x)$ и $C'(\xi) = \text{const} = 0$ при остальных ξ . Сопоставляя это условие с условием 2, получаем, что выражение для $C'(x)$ можно получить, подставляя в формулу (6) вместо C_p величину $-C_p$:

$$C'(x) = -\frac{1}{2} C_p \left[\Phi \left(\frac{p_x + x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_x - x}{\sigma_D} \right) \right]. \quad (13)$$

Учитывая, что здесь $C'(x) = C - C_p$ и $C_p = C_s$, получаем:

$$\begin{aligned} C(x) &= C_p \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\Phi \left(\frac{p_x + x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_x - x}{\sigma_D} \right) \right] \right\} = \\ &= C_s \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\Phi \left(\frac{p_x + x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_x - x}{\sigma_D} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (14)$$

Соответствующие формуле (14) кривые показаны на рис. 43. При ширине безрудного промежутка в исходном поле (величине $2p_x$), равной $6\sigma_D$, концентрация $C'(x)$ в точке $x=0$ составляет 98,7% от той величины, которая была бы здесь при бесконечно большой ширине названного промежутка. С уменьшением этой ширины аномалия уменьшается: при $2p_x = 4\sigma_D, 2\sigma_D, 1\sigma_D$ и $0,8\sigma_D$ она составляет соответственно 96, 68, 38 и 31% от величины C_s . Поэтому приближенно можно считать, что геологические тела или части одного тела, имеющие большую мощность и примерно одинаковую величину C_p , разделенные промежутками шириной $2p_x \geq 6\sigma_D$, создают практически отдельные ореолы. При меньшей же величине промежутка соответствующее ему изменение поля $C(x)$ выглядит как осложнение аномалии, вызванное одним телом с локальным перерывом.

Пусть теперь границы безрудного промежутка находятся в произвольных точках x_1, x_2 , причем по разные стороны промежутка находятся тела (или части одного тела) с разными концентрациями вещества μ : соответственно $C_p = C_{p1}$ и $C_p = C_{p2}$. Тогда на основании принципа аддитивности с помощью приведшихся формул можно получить

$$C(x) = \frac{1}{2} C_{p1} \left[1 - \Phi \left(\frac{x - x_1}{\sigma_D} \right) \right] + \frac{1}{2} C_{p2} \left[1 + \Phi \left(\frac{x - x_2}{\sigma_D} \right) \right], \quad (15)$$

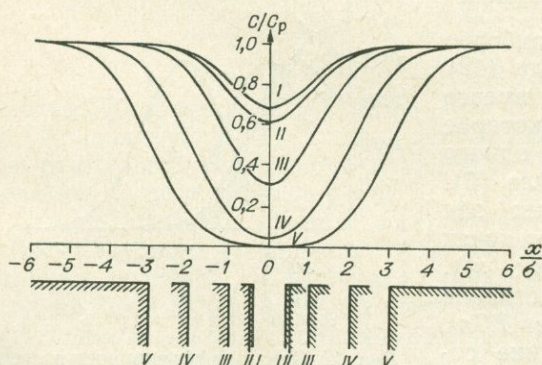


Рис. 43. Ореол диффузионного рассеяния в области промежутка между двумя полубесконечными телами в зависимости от исходной величины промежутка и σ_D .

I—V — положения границ промежутка (в разрезе) и соответствующие им кривые концентраций после рассеяния.

При $x_1 = -p_x, x_2 = p_x$ и $C_{p1} = C_{p2} = C_p$ эта формула дает как частный случай формулу (14). Нетрудно показать, что при $C_{p1} \neq C_{p2}$ изменение кривой $C(x)$, связанное с промежутком, оказывается при прочих равных условиях менее заметным, чем в предыдущем случае.

5. Выше мы рассматривали диффузию в неограниченной среде. Поставим теперь крайнее условие $C(\xi) = \text{const}(\xi) = C_p$ при $\xi \in (0; p_x)$ и $C(\xi) = 0$ при $\xi > p_x$, причем в точке $\xi = 0$ находится отражающая граница. Говоря геологическим язы-

ком, это может соответствовать, например, рассеянию μ из зоны около-жильно измененных пород мощностью p_x , когда жила представлена практически непроницаемым материалом и диффузия может идти только во вмещающих ее породах. Ось Ox перпендикулярна зальбанду жилы, точка $\xi=0$ находится на пересечении оси границей жилы, имеющей неограниченную протяженность по простиранию и падению.

Пользуясь известным положением о влиянии отражающей границы, покажем, что этот случай может быть описан формулами (6) и (8) при изменении лишь содержания обозначения p_x : здесь под этим обозначением следует понимать, согласно условию, мощность рассеивающегося тела, а не полумощность, как это было принято в п. 2 при выводе упомянутых формул.

Действительно, представим вначале вполне проницаемую плоскость S , перпендикулярную оси Ox и пересекающую ее в точке $x=0$. Наличие такой плоскости в связи с ее проницаемостью не изменит выкладок, сделанных в п. 2. Эта плоскость является для описанного там случая плоскостью симметрии. Поэтому число частиц, пересекающих плоскость слева направо, равно числу частиц, пересекающих ее справа налево. Но в таком случае распределение $C(x)$ не изменится, если проницаемую плоскость заменить отражающей. После этого распределение $C(x)$ в области $x>0$ не изменится, если устранить из рассмотрения область $x<0$, находящуюся слева от отражающей плоскости. Следовательно, как и в п. 2, для области $x>0$ в этом случае

$$C(x) = \frac{1}{2} \cdot \frac{C_s}{\Phi\left(\frac{p_x}{\sigma}\right)} \cdot \left[\Phi\left(\frac{p_x + x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_x - x}{\sigma_D}\right) \right], \quad (16)$$

где теперь p_x — мощность рассеивающегося тела справа от отражающей плоскости. Таким образом, сделанное утверждение доказано.

6. В случае, описываемом формулой (4), на границе сред с $C(\xi) = C_p$ и $C(\xi) = 0$ поддерживается постоянная во времени концентрация, равная $\frac{1}{2}C_p$. Согласно положениям математической физики, распределение концентраций правее границы (в области $x>0$) не изменится, если поддерживать граничную концентрацию любым способом, независимо от того, какие изменения производятся в области левее границы. Поэтому, используя вместо $\frac{1}{2}C_p$ общее обозначение постоянной концентрации C_0 на границе, получаем формулу для случая $C(\xi) = C_0$ при $\xi=0$, $C(\xi) = 0$ при $\xi>0$ (в математической физике аналогичная формула уже известна (Болтакс, 1961, и др.)):

$$C(x) = C_0 \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sigma_D}\right) \right], \quad (17)$$

где $x \geq 0$.

7. Предположим теперь, что $C_0=0$ до момента $t=0$, а при $t \geq 0$ концентрация на границе изменяется по некоторому закону $C_0=C_0(t)$. Выведем формулу для $C(x)$ при $x>0$ в момент $t=T>0$.

Разобьем T на n малых отрезков Δt_j и обозначим $t_i = \sum_{j=1}^i \Delta t_j$ ($i=1, 2, \dots, n$). Поле концентраций $C(x)$ с переменной величиной C_0 представим как сумму полей с постоянными значениями концентрации в точке $x=0$, возникающих в моменты t_i . Так, на протяжении всего времени T существует поле с постоянной величиной $C_0=C_0(0)$. Начиная с момента t_1 на него накладывается поле с концентрацией в точке $x=0$, равной $C_0(t_1) - C_0(0)$, и т. д. С момента t_i накладывается поле с концентрацией в точке $x=0$, равной $C_0(t_i) - C_0(t_{i-1})$, т. е., в сумме, в момент t_i в точке $x=0$ оказывается концентрация, равная $C_0(t_i)$, соответственно задан-

ной функции $C_0=C(t)$. Концентрацию в точке x в момент T , которую создало бы только поле, возникающее в момент t_i , обозначим $C(x)_i$. Тогда, согласно формуле (17) и с учетом, что для каждого выделенного поля $\sigma = \sqrt{2Dt}$, где $t=T-t_i$ — время формирования i -го поля, получаем:

$$\begin{aligned} C(x)_0 &= C_0(0) \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{\sqrt{2DT}} \right) \right], \\ C(x)_1 &= [C_0(t_1) - C_0(0)] \cdot \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{\sqrt{2D(T-t_1)}} \right) \right], \\ &\dots \dots \dots \\ C(x)_i &= [C_0(t_i) - C_0(t_{i-1})] \cdot \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{\sqrt{2D(T-t_i)}} \right) \right], \\ &\dots \dots \dots \end{aligned} \quad (18)$$

В связи с малостью Δt_i можно принять

$$C_0(t_i) - C_0(t_{i-1}) = \frac{\partial C_0(t_i)}{\partial t} \cdot \Delta t_i. \quad (19)$$

Суммируя выражения (18), с учетом равенства (19), и переходя к пределу $\Delta t_i \rightarrow 0 \quad n \rightarrow \infty$, получаем результирующую концентрацию в точках x в момент T :

$$C(x) = C_0(0) \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{\sqrt{2DT}} \right) \right] + \int_0^T \frac{\partial C_0(t)}{\partial t} \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{\sqrt{2D(T-t)}} \right) \right] dt. \quad (20)$$

Может быть использована также известная формула, выведенная для аналогичной задачи теплопроводности (Смирнов, 1957). В наших обозначениях, в применении к диффузии, она имеет вид:

$$C(x) = \frac{x}{2\sqrt{\pi D}} \cdot \int_0^T \frac{C_0(t)}{(T-t)^{3/2}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4D(T-t)}} \cdot dt. \quad (21)$$

Формулы (20) и (21) непротиворечивы и сводятся одна к другой при $x > 0$. Однако формула (21) имеет особенность при $x=0$: поскольку величина x входит множителем в ее правую часть, прямая подстановка $x=0$ дает здесь концентрацию на границе $C(0)=C_0(T)=\text{const}(T)=0$, что противоречит условию переменности величины $C_0(t)$ во времени. Это неудобно в ряде случаев, в том числе для численных методов решения некоторых задач. При использовании АЦВМ здесь могут возникнуть неудобства и в точках, близких к $x=0$. Поэтому выведенная здесь формула (20) является более предпочтительной.

Многомерная диффузия. Рассмотрим вначале двумерную диффузию.

1. Пусть $C(\xi, \eta) = \text{const} = C_p$ при $\xi \in (-p_x; +p_x)$, $\eta \in (-p_y; +p_y)$ и $C(\xi, \eta) = 0$ для остальных ξ, η , т. е. область с $C(\xi, \eta) = C_p$ имеет форму прямоугольника на плоскости xOy . Геологически это можно представить как диффузионное рассеяние столбообразного тела с прямоугольным поперечным сечением; ось тела параллельна координатной оси Oz (причем в этом направлении заметное диффузионное перемещение вещества не происходит из-за отсутствия градиента концентраций).

Подставляя названные условия в правую часть формулы (2), получаем после обычных преобразований:

$$\begin{aligned} C(x, y) &= \frac{1}{4} \cdot C_p \cdot \left[\Phi \left(\frac{p_y + x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_x - x}{\sigma_D} \right) \right] \times \\ &\times \left[\Phi \left(\frac{p_y + y}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_y - y}{\sigma_D} \right) \right]. \end{aligned} \quad (22)$$

Подставляя $x=y=0$ в выражение (22), найдем максимальное значение для $C(x, y)$:

$$C_s = C_p \cdot \Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right) \cdot \Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right), \text{ т. е.}$$

$$C_p = \frac{C_s}{\Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right) \cdot \Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right)}. \quad (23)$$

Используя это выражение для C_p , на основании формулы (22) можем написать:

$$C(x, y) = \frac{1}{4} \cdot \frac{C_s}{\Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right) \cdot \Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right)} \cdot \left[\Phi\left(\frac{p_x+x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_x-x}{\sigma_D}\right) \right] \times \\ \times \left[\Phi\left(\frac{p_y+y}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_y-y}{\sigma_D}\right) \right]. \quad (24)$$

При $y=0$ выражение (22) принимает вид:

$$C(x, 0) = \frac{1}{2} \cdot C_p \cdot \Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right) \cdot \left[\Phi\left(\frac{p_x+x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_x-x}{\sigma_D}\right) \right]. \quad (25)$$

Сравнивая это выражение с формулой (8), видим, что распределение концентраций по оси Ox в ореоле пласта, ограниченного по простиранию (по оси Oy), отличается от распределения в ореоле неограниченного пласта только множителем $\Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right) \leq 1$. То есть диффузия по оси Oy , связанная с ограниченностью пласта по этой оси, проявляется аналогично уменьшению величины C_p неограниченного пласта в соответствии с таким множителем. Это видно при сравнении кривых I и II на рис. 44: отражая два названных случая, они отличаются только величинами максимумов и одинаковы по форме.

Такое свойство будет использовано для решения обратной задачи. Заметим, что при $p_y = 2\sigma_D$ значение C_s , вычисленное по формуле (23) для двумерной диффузии, отличается от вычисленного по формуле (7) для одномерной диффузии только на 5% от этой величины. При больших p_y различие еще меньше. Поэтому при $p_y \geq 2\sigma_D$ для многих практических целей можно считать названные кривые концентрацией C по координатным осям Ox , Oy не различающимися.

2. Нетрудно получить и другие формулы, аналогичные приведенным выше для одномерной диффузии. Например, аналогично формуле (14), можно найти распределение концентраций по оси Oy , направленной по осевой линии пластообразного тела мощностью $2p_x$, имеющего перерыв в оруденении протяженностью $2p_y$. Если тело не ограничено по простиранию, то в данном случае $C(\xi, \eta) = C_p$ при $\xi \in [-p_x; +p_x] \wedge \eta \in ((-\infty; -p_y) \vee (p_y; \infty))$ и $C(\xi, \eta) = 0$ при остальных ξ, η . Подставляя эти условия в равенство (2), получаем после несложных преобразований

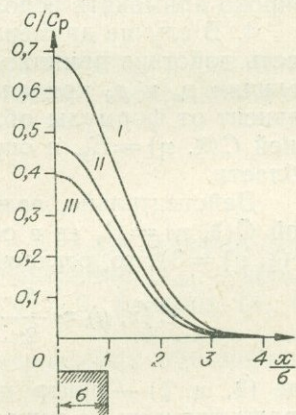


Рис. 44. C/C_p при горизонтальном диффузионном рассеянии тел различной формы. I — неограниченно протяженный пласт мощностью $2p = 2\sigma_D$; II — столбообразное тело с квадратным горизонтальным сечением при стороне квадрата $2p = 2\sigma_D$; III — столбообразное тело с круговым горизонтальным сечением диаметром $2R = 2\sigma_D$; внизу — контур тела до разрушения в вертикальном поперечном разрезе. Показана правая часть кривых и разреза; левая часть симметрична относительно оси ординат.

формулу для концентраций в ореоле по оси Oy :

$$C(0, y) = C_s \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\Phi \left(\frac{p_y + y}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_y - y}{\sigma_D} \right) \right] \right\}, \quad (26)$$

где, в отличие от формулы (14), $C_s = C_p \cdot \Phi \left(\frac{p_x}{\sigma_D} \right)$.

3. Прямоугольником можно аппроксимировать сечение различных геологических тел, что дает возможность применить выведенные формулы во многих практически важных случаях.

На рис. 44 кривая III показывает значения C/C_p , полученные для оси Ox путем численного интегрирования выражения (2) для случая, когда величина $C(\xi, \eta)$ равна C_p внутри круга диаметром $2R = 2\sigma_D$ и равна 0 вне его, при прохождении оси Ox через центр этого круга. В геологическом смысле кривая III отображает диффузионное рассеяние столбообразного тела с круговым сечением. По форме эта кривая не отличается от кривых I и II, рассчитанных по формулам (6) и (22). По значениям C/C_p кривая III совпадает с теоретическими кривыми, полученными вдоль осей Ox и Oy для тела с квадратным сечением при $2p_x = 2p_y = 0,88\sigma_D$. Если же диаметр кругового сечения увеличить до $1,1\sigma_D$, то соответствующая кривая совпадает по значениям C/C_p с кривой II. Вообще теоретическое распределение концентраций по осям Ox и Oy ореолов диффузионного рассеяния тел с эллиптическим (в частности, круговым) сечением с полуосями a и b в области $C(x, y) \in (C_s; 0,001 C_s)$ отличается не более чем на 10% от распределения $C(x, y)$ в поле диффузионного рассеяния тел с прямоугольным (в частности, квадратным) сечением, если $p_x = 1,1 a$, $p_y = 1,1 b$.

Сечение произвольной формы можно с любой наперед заданной точностью аппроксимировать суммой прямоугольников и воспользоваться для нахождения $C(x, y)$ свойством аддитивности. Это дает возможность широко применять использованный относительно простой аппарат.

4. В случае двумерной диффузии, как и одномерной, существует область действия принципа эквивалентности. При изменении в ее пределах величин p_x и p_y кривая $C(x, y)$ остается практически неизменной и не зависит от формулы области с отличной от нуля начальной концентрацией $C(\xi, \eta) = C_p$, а определяется лишь величиной продуктивности этой области.

Действительно, если малы размеры площади S_p , в пределах которой $C(\xi, \eta) = C_p$ (а в остальных точках пространства, как указывалось, $C(\xi, \eta) = 0$), то, согласно формуле (2) и теореме о среднем,

$$C(x, y) \approx \frac{S_p \cdot C_p}{2\pi \cdot \sigma_D^2} \cdot \exp(-((x - \xi)^2 + (y - \eta)^2)/(2\sigma_D^2)), \quad (27)$$

где (ξ, η, ζ) — центр площади S_p . Поскольку $S_p \cdot C_p = Q_p$ — площадная продуктивность, а точки (ξ, η) и (x, y) можно обозначить в векторной форме более кратко как соответственно ρ и r , то выражение (27) можно записать и так:

$$C(r) \approx \frac{Q_p}{2\pi \cdot \sigma_D^2} \cdot \exp(-(r - \rho)^2/(2\sigma_D^2)) = C_s \cdot \exp(-(r - \rho)^2/(2\sigma_D^2)), \quad (28)$$

где

$$C_s = \frac{Q_p}{2\pi \cdot \sigma_D^2} \quad (29)$$

(C_s , как и раньше, — максимальная концентрация в ореоле).

На основании свойства композиции процессов переноса область действия принципа эквивалентности определяется здесь по каждой из коор-

динатных осей в отдельности так же, как это было сделано для случая одномерной диффузии.

5. Аналогично можно получить формулы, описывающие различные случаи трехмерной диффузии. В частности, для диффузионного рассеяния тела, имеющего форму прямоугольного параллелепипеда с полудлинами ребер p_x, p_y, p_z , имеем: $C(\xi, \eta, \zeta) = \text{const} = C_p$ при $\xi \in [-p_x; +p_x] \wedge \eta \in [-p_y; +p_y] \wedge \zeta \in [-p_z; +p_z]$ и $C(\xi, \eta, \zeta) = 0$ при остальных ξ, η, ζ . Подставляя эти условия в формулу (3), получим:

$$C(x, y, z) = \frac{1}{8} C_p \left[\Phi\left(\frac{p_x + x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_x - x}{\sigma_D}\right) \right] \cdot \left[\Phi\left(\frac{p_y + y}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_y - y}{\sigma_D}\right) \right] \times \\ \times \left[\Phi\left(\frac{p_z + z}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_z - z}{\sigma_D}\right) \right] = \frac{1}{8} \cdot \frac{C_s}{\Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right) \cdot \Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right) \cdot \Phi\left(\frac{p_z}{\sigma_D}\right)} \times \\ \times \left[\Phi\left(\frac{p_x + x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_x - x}{\sigma_D}\right) \right] \cdot \left[\Phi\left(\frac{p_y + y}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_y - y}{\sigma_D}\right) \right] \times \\ \times \left[\Phi\left(\frac{p_z + z}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_z - z}{\sigma_D}\right) \right],$$

где

$$C_s = C_p \cdot \Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right) \cdot \Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right) \cdot \Phi\left(\frac{p_z}{\sigma_D}\right).$$

Аналогично предыдущему может быть определена область действия принципа эквивалентности. В данном случае при действии этого принципа

$$C(r) = \frac{Q_p}{(\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_D)^3} \cdot \exp\left(-\frac{(r - \rho)^2}{2\sigma_D^2}\right), \quad (30)$$

где $Q_p = V_p \cdot C_p$ — объемная продуктивность (количество μ в рассеивающемся теле, имеющем объем V_p), ρ и r — векторные изображения точек (ξ, η, ζ) и (x, y, z) соответственно.

Поглощающая среда

Рассмотрим случай, когда диффузия идет в жидкой фазе области $x \geq 0$, причем в точке $x=0$ поддерживается концентрация $C_{ож}$, а поглощение μ твердой фазой идет при $x = \text{const}$ ($x, t > 0$), $\beta = \text{const}$ (x, t). При $t=0$ примем $C_{жк} = C_{т} = 0$ для всех $x \geq 0$.

Согласно формуле (9, § 1), для рассматриваемого одномерного варианта $\left(\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = 0\right)$ получаем:

$$\frac{\partial C_{жк}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_{жк}}{\partial x^2} - \kappa C_{жк}. \quad (31)$$

Применим подстановку

$$C_{жк} = C_{\kappa} \cdot e^{-\kappa t}, \quad C_{\kappa} = C_{жк} \cdot e^{\kappa t}. \quad (32)$$

Тогда вместо (31) получаем однородное уравнение Фика:

$$\frac{\partial C_{\kappa}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_{\kappa}}{\partial x^2}. \quad (33)$$

Поскольку при $t=0$ для всех $x > 0$, по условию $C_{жк} = 0$, то, согласно выражениям (32), при $t=0$ для всех x должно быть $C_{\kappa} = 0$. При $x=0$,

согласно условию, $C_{ж} = C_{ож}$ для всех t ; поэтому

$$C_{ож} = C_{ож} \cdot e^{\kappa t}, \quad (34)$$

где $C_{ож}$ — величина $C_{ж}$ при $x=0$.

Таким образом, диффузия с поглощением при постоянной концентрации в точке $x=0$ должна привести, согласно зависимости (34), к такому же результату, как диффузия без поглощения с переменной во времени концентрацией в точке $x=0$. Но для последнего условия решение уже имеется в виде формулы (20), которая в данном случае принимает вид:

$$C_{ж} = C_{ож}(0) \cdot \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2DT}}\right) \right] + \int_0^T \frac{\partial C_{ож}(t)}{\partial t} \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2D(T-t)}}\right) \right] dt. \quad (35)$$

Согласно (34), $\partial C_{ож}/\partial t = \kappa C_{ож} \cdot e^{\kappa t}$, причем при $t=0$ имеем $C_{ож} = C_{ож}$. Подставляя эти выражения в (35) и производя затем деление на $e^{\kappa T}$, получаем, принимая во внимание (32):

$$C_{ж} = C_{ож} \left\{ e^{-\kappa T} \cdot \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2DT}}\right) \right] + \kappa \int_0^T e^{-\kappa(T-t)} \cdot \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2D(T-t)}}\right) \right] dt \right\}. \quad (36)$$

Учитывая, что $\sqrt{2DT} = \sigma$, $\sqrt{2D(T-t)} = \sqrt{2DT(1-t/T)} = \sigma\sqrt{1-t/T}$ и обозначая $y = 1-t/T$, получаем:

$$C_{ж} = C_{ож} \left\{ e^{-\kappa T} \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sigma_D}\right) \right] + \kappa T \int_0^1 e^{-\kappa T y} \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sigma_D \sqrt{y}}\right) \right] dy \right\}. \quad (37)$$

Из формулы (37) следует, что при поставленных условиях $C_{ж}$ определяется двумя параметрами: σ_D и κT , а не тремя входящими в них величинами D , κ и T . Как бы последние ни менялись, $C_{ж}$ не изменится, если остаются неизменными $\sigma_D = \sqrt{2DT}$ и κT . Это важно для решения обратной задачи.

Чем больше κT , тем более кривая $C_{ж}$ приближается к экспоненте (рис. 45). Расчет по формуле (37) показывает, что при $\kappa T \geq 10$ в пределах области с концентрациями $C_{ж} \in (C_{ож}; 0,001 C_{ож})$ функция $C_{ж}(x, T)$ имеет практически вид экспоненты (при изображении в полулогарифмическом масштабе — вид прямой): отклонение фактических значений $C_{ж}$ от этой предельной функции в названном диапазоне при $\kappa T = 10$ не превышает $0,003 C_{ож}$. В бо-

Рис. 45. Распределение концентраций около граничной плоскости, на которой поддерживается постоянная концентрация. $\sigma_D = 3L$ усл. ед.

а — арифметический масштаб; б — полулогарифмический масштаб. 1 — распределение концентраций в любой фазе при диффузии в той же фазе без поглощения; 2 — распределение концентраций в твердой фазе при диффузии в жидкой фазе с $\kappa T \rightarrow 0$; 3 — распределение концентраций в жидкой фазе при $\kappa T = 1$; 4 — распределение концентраций в твердой фазе при диффузии в жидкой фазе с $\kappa T = 1$; 5 — распределение концентраций в твердой и жидкой фазах при диффузии в жидкой с $\kappa/D = -0,86$, $\kappa T > 10$; x — расстояние от граничной плоскости.

лее далеких от максимума областях такое приближение происходит позднее. Предельная экспонента имеет вид:

$$C_{ж}(x) = C_{ож} \cdot \exp\left((- \sqrt{2\kappa T/\sigma_D}) \cdot x\right). \quad (38)$$

Поскольку $\sigma_D = \sqrt{2DT}$, то вместо (38) можно написать:

$$C_{\text{ж}}(x) = C_{\text{ож}} \cdot \exp\left(-\sqrt{\frac{\kappa}{D}} \cdot x\right). \quad (39)$$

В полулогарифмическом масштабе эта кривая имеет вид прямой:

$$\lg C_{\text{ж}} = \lg C_{\text{ож}} - \sqrt{\kappa/D} \cdot \lg e \cdot M \cdot L \cdot x, \quad (40)$$

где M — модуль логарифмического масштаба по оси ординат (концентраций), L — числовой масштаб по оси абсцисс (расстояний). Следовательно, угол наклона этой прямой к оси абсцисс определяется выражением:

$$\operatorname{tg} \alpha = -\sqrt{\kappa/D} \cdot \lg e \cdot M \cdot L. \quad (41)$$

Согласно всем формулам, принимаемым для описания диффузии, в том числе согласно (37), для любого момента $t > 0$ оказывается $C_{\text{ж}} > 0$ во всех точках, удаленных от источника μ на любые конечные расстояния. Следовательно, в любой точке твердой фазы поглощение μ из жидкой фазы идет в течение всего времени T . Это утверждение выполняется с точностью, которая обусловлена допущениями, положенными в основу математической теории диффузии и теплопроводности; как известно, практически они оправданы. Поэтому формулу для $C_{\text{т}}(x)$ получим, заменив в правой части формулы (37) обозначение T на переменную величину t и подставив полученное выражение в формулу (12, § 1), полагая в ней $t_k = T$:

$$C_{\text{т}}(x, T) = \frac{\beta}{1-\beta} \kappa C_{\text{ож}} \int_0^T \left\{ e^{-\kappa t} \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2Dt}}\right) \right] + \right. \\ \left. + \kappa t \int_0^1 e^{-\kappa ty} \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2Dty}}\right) \right] dy \right\} dt. \quad (42)$$

В точке $x=0$, где $C_{\text{ж}} = C_{\text{ож}} = \text{const}$, согласно формуле (12, § 1), получаем непосредственно:

$$C_{\text{от}} = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \kappa T \cdot C_{\text{ож}}. \quad (43)$$

Отсюда:

$$\frac{C_{\text{т}}}{C_{\text{от}}} = \frac{1}{T} \int_0^T \frac{C_{\text{ж}}}{C_{\text{ож}}} dt = \frac{1}{T} \int_0^T \left\{ e^{-\kappa t} \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2Dt}}\right) \right] + \kappa t \int_0^1 e^{-\kappa ty} \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2Dty}}\right) \right] dy \right\} dt. \quad (44)$$

На рис. 46 показано изменение концентраций в жидкой и твердой фазах в фиксированных точках с изменением времени. Видно, что концентрации в твердой фазе вначале меньше концентраций в жидкой фазе и растут медленнее. Затем концентрации в жидкой фазе перестают увеличиваться (в пределе, согласно формуле (39), они становятся независимыми от времени). Концентрации же в твердой фазе становятся приближенно прямо пропорциональными времени и предельным значениям $C_{\text{ж}}$ в соответствующих точках. Поэтому после истечения некоторого времени оказывается $C_{\text{т}} > C_{\text{ж}}$ (тем позднее, чем больше x). Вообще, как и в случае фильтрации, здесь можно найти время, начиная с которого появляется и расширяется от граничной плоскости зона со значениями $C_{\text{т}}$, превышающими в заданное число раз величины $C_{\text{ж}}$ в тех же точках.

Величина $C_{\text{от}}$ при оговоренных условиях всегда прямо пропорциональна времени T . Поэтому для больших κT , когда величина $C_{\text{т}}$ стано-

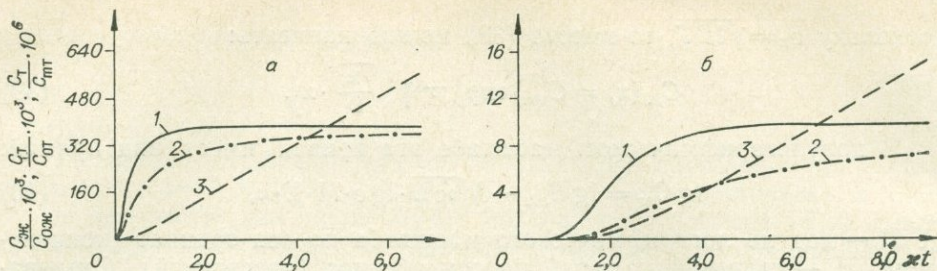


Рис. 46. Изменение концентраций в фиксированных точках ореола со временем при поддержании на граничной плоскости постоянной концентрации в жидкой фазе.

$a - x=0,01$ усл. ед.; $b - x=0,05$ усл. ед. 1 — отношение концентрации в жидкой фазе в точке x в момент t к концентрации в той же фазе на границе ($C_{ж}/C_{ож}$); 2 — отношение концентрации в твердой фазе в точке x в момент t к концентрации, образовавшейся в той же фазе к этому моменту на границе ($C_{т}/C_{от}$); 3 — отношение концентраций в твердой фазе в точке x в момент t к концентрации, достигаемой на границе к моменту T — максимальному выбранному времени формирования ореола ($C_{т}/C_{ст}$), $\kappa T=4300$; $\sigma_D \sqrt{2Dt}=1$ усл. ед.

вится приближенно прямо пропорциональной T и $C_{ж}$, отношение $C_{т}/C_{от}$ перестает зависеть от времени и оказывается приближенно прямо пропорциональным величине $C_{ж}$ для той же точки, для которой определяется $C_{т}$. Следовательно, при больших значениях κT кривая $C_{т}/C_{от}$ оказывается такой же экспонентой, как и кривая $C_{ж}/C_{ож}$.

В области $C_{т} \in (C_{от}; 0,001 C_{от})$ при $\kappa T \geq 10$ значения $C_{т}$, вычисленные по формуле (44), отличаются в пределах лишь 10% определяемой величины от тех значений, которые наблюдались бы при строго экспоненциальной зависимости

$$C_{т}(x) = C_{от} \cdot \exp(-\sqrt{\kappa/D} \cdot x). \quad (45)$$

Таким образом, при $\kappa T \geq 10$ практически можно принять

$$\frac{C_{т}}{C_{от}} = \frac{C_{ж}}{C_{ож}} = \exp\left(-\frac{1}{\sigma} \sqrt{2\kappa T} \cdot x\right) = \exp(-\sqrt{\kappa/D} \cdot x)^*. \quad (46)$$

При этом для твердой фазы, как и для жидкой, можно записать соотношения между координатами графика на чертеже:

$$\lg C_{т} = \lg C_{от} - \sqrt{\kappa/D} \cdot \lg e \cdot M \cdot L \cdot x, \quad (47)$$

$$\lg \alpha = \sqrt{\kappa/D} \cdot \lg e \cdot M \cdot L, \quad (48)$$

что используется для решения обратной задачи (гл. V).

Характер и скорость приближения кривых концентраций к экспоненте с ростом κT (начиная от малых x) видны на рис. 45 и на палетках набора 3 прилагаемого атласа.

§ 4. ОБЩИЕ СВОЙСТВА ФИЛЬТРАЦИОННЫХ И ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

Сравнивая формулы (2, 11, § 2) и формулу (46), видим, что при соответствующих этим формулам условиях формы фильтрационных и диффузионных аномалий практически одинаковы, если одинаковы значения $\lambda = \kappa/U$ при фильтрации и $\sqrt{\kappa/D}$ при диффузии. Сближение этих форм происходит одновременно со сходимостью к экспонентам кривых $C_{ж}/C_{ож}$ и $C_{т}/C_{от}$ при фильтрации и диффузии, т. е. с увеличением параметров UT и κT . Поскольку в оба эти параметра входит время, то

* В зависимости от требуемой точности такое допущение можно делать, разумеется, и при $\kappa T < 10$, особенно для малых x .

в связи с большой длительностью многих геологических процессов можно предположить, что такая сходимость должна проявляться нередко.

Падение $C_{ж}$ по экспоненте независимо от времени, т. е. постоянство $C_{ж}$ во времени в любой точке x , означает, что распределение правее любой точки не изменится, если значение $C_{ж}$ в этой точке принять за $C_{ож}$ и, поддерживая эту величину постоянной, как угодно менять поле левее нее. Напомним, что так было и при фильтрации.

Из установленной аналогии следует, что при больших κT (практически при $\kappa T \geq 10$) для описания процессов диффузии можно применить все те же положения, которые были найдены для фильтрации при больших UT (практически при значениях UT , превышающих в несколько раз значения x для точек в пространстве наблюдений).

В частности, рис. 36 иллюстрирует изменение $C_{т}$, связанное с процессом одномерной диффузии в ступенчато-однородной среде, если под обозначением λ понимать $\sqrt{\kappa/D}$.

Среду с непрерывно меняющимися параметрами κ и D можно представить как ступенчато-однородную с бесконечным числом бесконечно тонких слоев. Согласно сказанному выше, в каждом из этих слоев при больших κT процесс диффузии с соответствующей данному слою величиной $\sqrt{\kappa/D} = A$ приводит к приближенно такому же распределению концентраций, к какому привел бы процесс фильтрации с $\lambda = A$ при том же граничном условии. Но в таком случае аналогия соблюдается и для среды в целом.

Это позволяет упростить многие построения, поскольку математическое описание процесса фильтрации проще, чем процесса диффузии.

В частности, теперь для случая линейной аппроксимации изменения параметра $\sqrt{\kappa/D}$ с расстоянием для той части одномерной области $x > x_{и}$, где значение κT достаточно велико, можно принять формулы, выведенные в § 2 для фильтрации с линейным изменением κ вдоль одномерного потока, приняв $t_k = T$ и заменив λ на $\sqrt{\kappa/D}$:

$$C_{ж} = C_{иж} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot Y \cdot (x - x_{и})^2\right), \quad (1)$$

$$C_{т} = \sqrt{eY} \cdot C_{тс} \cdot (x - x_{и}) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} Y \cdot (x - x_{и})^2\right), \quad (2)$$

$$x_{ст} = \frac{1}{\sqrt{Y}} + x_{и}, \quad (3)$$

где теперь

$$Y = \frac{\partial}{\partial x} (\sqrt{\kappa/D}). \quad (4)$$

Заметим, что входящий в величину

$$C_{тс} = \frac{\beta}{1-\beta} \cdot \frac{G}{\sqrt{e \cdot Y}} \cdot C_{иж} \cdot T \quad (5)$$

параметр $G = \frac{\partial \kappa}{\partial x}$ сохраняет прежний физический смысл, несмотря на изменение содержания Y , поскольку величина κ определяется одинаково для диффузии и для фильтрации.

На рис. 47 показаны результаты экспериментального изучения процесса диффузии в среде с переменными κ и D . Для этого устанавливался примерно постоянный градиент температур вдоль вертикальной стеклянной трубки, наполненной песком с диаметром частиц от 0,2 до 0,3 мм на протяжении (по длине трубки) 42 см. В более нагретый, герметически изолированный верхний конец трубки вводился (после прогрева) отвод от колбочки с жидкой ртутью, так что ее пары могли диффундировать в песок. Такое расположение нагревателя и источника ртути, обратное

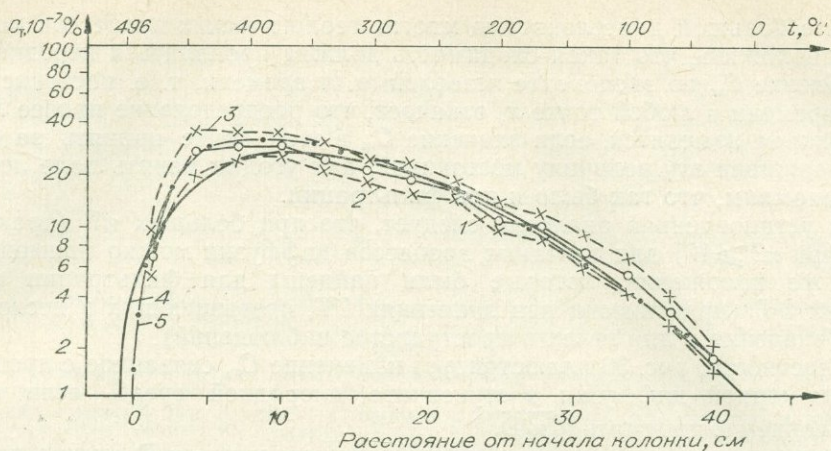


Рис. 47. Распределение ртути вдоль диффузионной колонки при наличии градиента температуры.

1 — экспериментальная кривая C_T ; 2, 3 — границы доверительного интервала надежности 0,95; 4 — теоретическая кривая C_T для упрощенной модели с $\sqrt{\gamma} = 2,1$ усл. ед.

($\gamma = \text{grad} \sqrt{\frac{\kappa}{D}}$); 5 — теоретическая кривая, полученная с учетом зависимости

$D \approx A \sqrt{\tau}$, $\kappa \approx K (\tau_{\text{н}} - \tau)$ (τ — температура, °К) при $\tau_{\text{н}} = 769$, $A = 0,003125$, $K = 0,0000825$ по методу композиционного математического моделирования (см. § 5, гл. IV).

обычному для геологических условий, было выбрано для исключения влияния конвекционного потока воздуха, который возник бы при нагреве нижнего конца и подъеме более легких нагретых частей воздуха с вытеснением менее нагретых. По прошествии 8 часов источник паров ртути отключался, установка охлаждалась до комнатной температуры и производился анализ песка на ртуть. В эксперименте принимал участие сотрудник Института геохимии СО АН СССР Г. П. Годвинский; вещественный анализ песка проводился в лаборатории Центральной геохимической экспедиции Казахского геофизического треста прибором, разработанным В. З. Фурсовым и И. И. Степановым.

Предварительно было установлено, что результаты практически не зависят от времени, прошедшего с момента окончания эксперимента до вещественного анализа, если это время колеблется в пределах нескольких часов (можно было ожидать влияния некоторого перераспределения ртути).

Было проведено 30 экспериментов в примерно одинаковых условиях. В качестве окончательных оценок концентрации ртути на определенных расстояниях от начала диффузионной колонки принимались средние геометрические от полученных значений (с исключением систематических расхождений).

С уменьшением температуры τ величина κ растет, а D уменьшается. Поэтому, направляя ось Ox в сторону падения τ , в первом приближении примем, что величина κ прямо пропорциональна, а значение D обратно пропорционально разности $x - x_{\text{н}}$ (на основании тех же аппроксимационных соображений, которые были приведены в § 2), т. е. $\kappa = k_1 \cdot (x - x_{\text{н}})$, $D = k_2 / (x - x_{\text{н}})$, где k_1 и k_2 — некоторые коэффициенты пропорциональности. Тогда $\sqrt{\kappa/D} = \sqrt{k_1 \cdot k_2} \cdot (x - x_{\text{н}})$, $\frac{\partial}{\partial x} \sqrt{\kappa/D} = Y = \sqrt{k_1/k_2} =$

$= \text{const}$, и можно применить формулы (1—5) для получения характеристики общей (заведомо несколько сглаженной) формы кривых распределения концентраций.

Действительно, полученная в результате эксперимента кривая C_T (см. рис. 47) соответствует в общих чертах форме кривых, рассчитан-

ных по формуле (2) и показанных в атласе (набор 4). Теоретическая кривая из этого набора, имеющая минимальное отклонение от экспериментальной, показана и на рис. 47. Как видим, соответствие между этой кривой и экспериментальной вполне удовлетворительно в области относительно больших значений $x - x_n$ (где значение κT сравнительно велико); в области же малых $x - x_n$ (где значение κT также мало) наблюдается существенное расхождение, предопределенное отклонениями от условий, для которых построена теоретическая кривая.

Физическая природа аналогии между описанными полями концентраций, образованными диффузионными и фильтрационными процессами при больших κT , может быть легко понята, когда рост κT обуславливается величиной κ . Действительно, если диффундирующие частицы поступают в поглощающую среду только с одной стороны (например, от границы, пересекающей ось Ox в точке $x=0$), то при большом значении κ они успевают до поглощения пройти некоторое расстояние внутрь среды, но в большинстве случаев не успевают вернуться. Таким образом, движение частиц оказывается односторонним, направленным, как при фильтрации, преимущественно в одну сторону.

На основании описанной аналогии и сказанного выше об образовании при фильтрации зон горных пород с относительно резкими границами по C_T , нетрудно показать, что подобные зоны должны образовываться и при диффузии, если κ уменьшается со временем по мере насыщения горной породы веществом μ . Экспериментально такие явления были довольно хорошо изучены в физике: в ряде случаев μ диффундирует сквозь агрегат соевых кристаллов, а затем поглощается, наращивая их в сторону диффузионного потока (Зайт, 1958, и др.). При постоянстве $C_{ок}$ перемещение границы такого агрегата в одномерном случае приближенно прямо пропорционально \sqrt{t} . Этот экспериментально установленный факт объясняется, очевидно, тем, что поступление вещества сквозь непоглощающий слой определяется величиной $\sigma = \sqrt{2Dt}$: в случае однородной неограниченной среды, при одномерной диффузии с функцией источника $g = \text{const}$ ($x, t = 0$), величина σ определяет среднее квадратическое расстояние диффундирующих частиц от места их входа в рассматриваемую среду (Дубов, 1966₂).

В геологии существует представление, что для фильтрационных процессов характерно образование зон с резкими границами, а для диффузионных — наличие минералов промежуточного состава. Предполагается, что это «дает принципиальную возможность отличать продукты природного инфильтрационного* метасоматоза от диффузионного» (Коржинский, 1952). Согласно изложенным выше теоретическим положениям и упомянутым уже известным в физике экспериментальным данным, такого различия фильтрационных и диффузионных процессов по резкости границ зон нет (хотя некоторые детали их образования могут отличаться, в частности скорость перемещения границ). Кроме того, следует учитывать, что понятие резкости физических границ является условным.

Из аналогии результатов фильтрационных и диффузионных процессов при больших UT и κT следует также возможность применения здесь выводов, сделанных в предыдущем параграфе, о сокращении по вертикали рудных тел при увеличении абсолютной величины градиента температур, о сдвиге при этом точки x_0 в область высоких температур, о телескопировании при отложении разных минералов и т. д.

Рассмотрим еще одно явление, которое может наблюдаться в результате как фильтрационных, так и диффузионных процессов.

* В нашей терминологии — фильтрационного.

Если источники веществ, выпадающих из фильтрационного или диффузионного потока, не иссякают достаточно долгое время, то канал, по которому движется поток, перекрывается этими веществами. Тогда поступление новых их порций в область выше места максимального выпадения замедляется. В область же канала, расположенную ниже этого места, поступление веществ продолжается путем конвекции и диффузии даже в том случае, если канал полностью перекрывается.

Если повышение температуры, необходимое для формирования рудного тела в данном месте, обусловлено интрузивом, то должен наступить момент, когда в связи с остыванием точки инверсии различных веществ начнут перемещаться вниз. Первыми в зону ниже области перекрытия опустятся точки инверсии относительно высокотемпературных веществ (выпадающих при высоких температурах). Поэтому рудное тело будет наращиваться книзу прежде всего этими веществами. В случае истощения источника такими веществами или после остывания интрузива до такой степени, когда высокотемпературные вещества уже не смогут растворяться и выноситься из него и окружающих пород, поступление этих веществ к рудному телу прекращается. Сравнительно же низкотемпературные вещества еще продолжают поступать, и нижние горизонты рудного тела слагаются ими.

Это означает, что в указанном случае в нижних горизонтах рудных тел должна наблюдаться зональность, обратная зональности верхних горизонтов. Примеры фактических наблюдений обратной зональности общеизвестны. В частности, над полиметаллическими месторождениями часто наблюдаются относительно протяженные ореолы цинка, глубже в ореолах преобладает свинец. Преимущественно свинцовыми минералами сложены и верхние горизонты сплошных сульфидных рудных тел. В нижних же частях рудных тел вновь появляется в больших концентрациях цинк, иногда там образуются сплошные скопления его минералов.

§ 5. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ ПОЛЕЙ

Как уже упоминалось выше, математическое описание геохимических полей математическими формулами традиционного, классического вида пригодно лишь в относительно простых случаях. Для удовлетворения запросов практики необходимо применение новых способов, относящихся к так называемым численным методам. Ниже мы изложим два таких способа.

Палетки

Одномерная (линейная) палетка. Рассмотрим одномерную диффузию, описываемую формулой (1, § 3) при любой возможной функции $C_0(\xi)$, когда эта формула, вообще говоря, не сводится к пригодным для вычислений выражениям классического вида.

Разобьем промежутки $\xi \in (-\infty; \infty)$ на непересекающиеся отрезки с границами $\{\xi_i\}_{i=-\infty}^{\infty}$. В силу аддитивности диффузионных полей, при поставленных условиях $C(x) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \Delta C(x)_i$, где $\Delta C(x)_i$ — часть концентрации $C(x)$, образовавшаяся в точке x за счет диффузионного рассеяния вещества μ из i -го отрезка (ξ_{i-1}, ξ_i) . Выражение для $\Delta C(x)_i$ можно найти из формулы (1, § 3), если исключить влияние остальных отрезков, т. е. если принять на них $C_0(\xi) = 0$, или, что то же самое, если ограничить

интегрирование границами названного отрезка:

$$\Delta C(x)_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_D} \int_{\xi_{i-1}}^{\xi_i} C_0(\xi) \cdot \exp(-(x-\xi)^2/(2\sigma_D^2)) d\xi. \quad (1)$$

Если отрезок (ξ_{i-1}, ξ_i) мал, то величину $C_0(\xi)$ в нем можно считать постоянной, равной концентрации в некоторой точке $\xi'_i \in (\xi_{i-1}; \xi_i)$, и вынести ее в выражении (1) за знак интеграла:

$$\begin{aligned} \Delta C(x)_i &= \frac{C(\xi'_i)}{\sqrt{2\pi} \sigma_D} \int_{\xi_{i-1}}^{\xi_i} \exp(-(x-\xi)^2/(2\sigma_D^2)) d\xi = \\ &= \frac{1}{2} C(\xi'_i) \cdot \left[\Phi\left(\frac{x-\xi_{i-1}}{\sigma_D}\right) - \Phi\left(\frac{x-\xi_i}{\sigma_D}\right) \right], \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{\Delta C(x)_i}{C(\xi'_i)} = \frac{1}{2} \left[\Phi\left(\frac{x-\xi_{i-1}}{\sigma_D}\right) - \Phi\left(\frac{x-\xi_i}{\sigma_D}\right) \right]. \quad (3)$$

При $x=0$ из (3) получаем:

$$\frac{\Delta C_i}{C(\xi'_i)} = \frac{1}{2} \left[\Phi\left(\frac{\xi_i}{\sigma_D}\right) - \Phi\left(\frac{\xi_{i-1}}{\sigma_D}\right) \right], \quad (4)$$

где $\Delta C_i = \Delta C(0)_i$. Согласно (4),

$$\Phi\left(\frac{\xi_i}{\sigma_D}\right) = 2 \frac{\Delta C_i}{C(\xi'_i)} + \Phi\left(\frac{\xi_{i-1}}{\sigma_D}\right). \quad (5)$$

Эта формула положена в основу расчета одномерной палетки, с помощью которой узнается $C(x)$ в любой точке, принимаемой за начало координат (центр палетки): задаваясь постоянной величиной $\frac{\Delta C_i}{C(\xi'_i)} = 0,01$, при

$\xi_0=0$ вычислим вначале величину $\Phi\left(\frac{\xi_1}{\sigma_D}\right)$ (учитывая, что $\Phi\left(\frac{\xi_0}{\sigma_D}\right) = \Phi(0) = 0$), а по этой величине и таблице интеграла вероятностей найдем значение $\frac{\xi_1}{\sigma_D}$. Подставляя в (5) это значение, найдем $\frac{\xi_2}{\sigma_D}$ и т. д.

Аналогично найдем $\frac{\xi_{-1}}{\sigma_D}, \frac{\xi_{-2}}{\sigma_D}, \dots$. Таким образом, для заданного σ_D получаем разбиение пространства точек $\xi \in (-\infty; \infty)$ на такие отрезки, что диффузионное рассеяние каждого из них создает в точке $x=0$ к моменту t (когда достигается заданная величина $\sigma_D = \sqrt{2Dt}$) часть концентрации, равную $0,01 C_0(\xi'_i)$. Всего таких отрезков должно быть 100, и они должны охватывать все точки $\xi \in (-\infty; \infty)$, т. е.

$$\frac{\xi_{-50}}{\sigma_D} = -\infty, \quad \frac{\xi_{50}}{\sigma_D} = \infty. \quad (6)$$

В силу равенства (6), величины $\frac{\xi_i}{\sigma_D}$ являются конечными только при $|i| = 1, 2, \dots, 49$.

Отбрасывание неизображаемых (из-за бесконечной длины) отрезков (ξ_{-49}, ξ_{-50}) и (ξ_{49}, ξ_{50}) при $C_0(\xi) = \text{const} = C_\xi$ привело бы к занижению $C(0)$ на $0,02 C_\xi$, т. е. на 2% от C_ξ . Разобьем каждый из этих отрезков на 10 примыкающих последовательно друг к другу отрезков, таких, чтобы рассеяние вещества любого из них создавало в точке $x=0$ приращение концентрации $\Delta C = 0,001 \cdot C_0(\xi'_i)$. Все они имеют

конечные размеры, кроме крайних левого и правого, простирающихся соответственно в $-\infty$ и в $+\infty$. Отбрасывание этих отрезков при $C(\xi) = \text{const} = C_\xi$ приводит к уменьшению $C(0)$ лишь на $0,002 C_\xi$, чем можно пренебречь для многих практически важных случаев. Найденные значения $\frac{\xi_i}{\sigma_D}$ для положительных i помещены в табл. 6.

Таблица 6

Результаты расчета одномерной палетки для построения диффузионного поля при $\sigma_D = 5$ усл. ед.

| i | ξ_i/σ_D | ξ_i | i | ξ_i/σ_D | ξ_i | i | ξ_i/σ_D | ξ_i | ξ_i'/σ_D | ξ_i' |
|-----|------------------|---------|-----|------------------|---------|------|------------------|---------|-------------------|----------|
| 1 | 0,025 | 0,125 | 20 | 0,526 | 2,630 | 39,0 | 1,226 | 6,130 | | |
| 2 | 0,050 | 0,250 | 21 | 0,553 | 2,765 | 40,0 | 1,280 | 6,400 | | |
| 3 | 0,075 | 0,375 | 22 | 0,583 | 2,915 | 41,0 | 1,340 | 6,700 | | |
| 4 | 0,100 | 0,500 | 23 | 0,613 | 3,065 | 42,0 | 1,406 | 7,030 | | |
| 5 | 0,126 | 0,630 | 24 | 0,643 | 3,215 | 43,0 | 1,476 | 7,380 | | |
| 6 | 0,150 | 0,750 | 25 | 0,674 | 3,370 | 44,0 | 1,555 | 7,775 | | |
| 7 | 0,176 | 0,880 | 26 | 0,706 | 3,530 | 45,0 | 1,645 | 8,245 | | |
| 8 | 0,200 | 1,000 | 27 | 0,740 | 3,700 | 46,0 | 1,750 | 8,750 | | |
| 9 | 0,228 | 1,140 | 28 | 0,770 | 3,850 | 47,0 | 1,880 | 9,400 | | |
| 10 | 0,254 | 1,270 | 29 | 0,806 | 4,030 | 48,0 | 2,050 | 10,250 | 1,96 | 9,80 |
| 11 | 0,280 | 1,400 | 30 | 0,840 | 4,200 | 49,0 | 2,325 | 11,625 | 2,17 | 10,85 |
| 12 | 0,305 | 1,525 | 31 | 0,880 | 4,400 | 49,1 | 2,365 | 11,825 | | |
| 13 | 0,330 | 1,650 | 32 | 0,916 | 4,580 | 49,2 | 2,410 | 12,050 | | |
| 14 | 0,360 | 1,800 | 33 | 0,954 | 4,770 | 49,3 | 2,460 | 12,300 | | |
| 15 | 0,385 | 1,925 | 34 | 0,994 | 4,970 | 49,4 | 2,510 | 12,550 | | |
| 16 | 0,412 | 2,060 | 35 | 1,036 | 5,180 | 49,5 | 2,575 | 12,875 | | |
| 17 | 0,440 | 2,200 | 36 | 1,080 | 5,400 | 49,6 | 2,655 | 13,275 | | |
| 18 | 0,467 | 2,335 | 37 | 1,126 | 5,630 | 49,7 | 2,750 | 13,750 | | |
| 19 | 0,496 | 2,480 | 38 | 1,175 | 5,875 | 49,8 | 2,890 | 14,450 | 2,81 | 14,05 |
| | | | | | | 49,9 | 3,100 | 15,500 | 2,97 | 14,85 |

По соображениям удобства изображения выбирается величина σ_D . Тогда по вычисленным значениям $\frac{\xi_i}{\sigma_D}$ находятся значения ξ_i . Этим значениям на палетке соответствуют расстояния штрихов — границ отрезков (ξ_{i-1}, ξ_i) — от центра (рис. 48). Величины ξ_i при выбранном значении σ_D для облегчения построений предварительно вычисляются в таблице. В качестве примера в табл. 6 это сделано для значения $\sigma_D = 5$ усл. ед., использованного при построении палетки, изображенной на рис. 48.

Интервал (ξ_{i-1}, ξ_i) делится точкой ξ_i' на два отрезка: (ξ_{i-1}, ξ_i') и (ξ_i', ξ_i) . Поэтому можно написать: $\Delta C_i = \Delta C_{i1} + \Delta C_{i2}$, где ΔC_{i1} и ΔC_{i2} — те части величины ΔC_i , которые обусловлены поступлением в точку $x=0$ вещества из отрезков соответственно (ξ_{i-1}, ξ_i') и (ξ_i', ξ_i) . Если $C_0(\xi)$ может изменяться произвольно в (ξ_{i-1}, ξ_i) , то принятие для всего этого отрезка $C_0(\xi) = C_0(\xi')$ может приводить к ошибке в вычислении ΔC_i . Математическое ожидание такой ошибки равно нулю, если $M(\Delta C_{i1}) = M(\Delta C_{i2})$. Это означает, что точку ξ_i' можно найти тем же способом, что и точку ξ_i , приняв лишь влияние отрезка (ξ_{i-1}, ξ_i') на величину $C(0)$ вдвое меньшим, чем это было сделано для (ξ_{i-1}, ξ_i) . Определенные таким образом точки ξ_i' показаны точками в соответствующих отрезках (ξ_{i-1}, ξ_i) палетки (см. рис. 48). В большинстве отрезков эти точки сов-

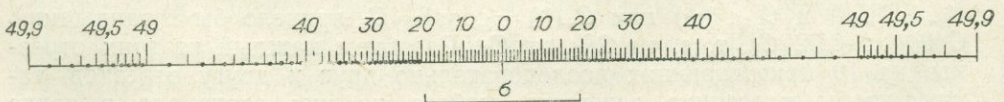


Рис. 48. Одномерная (линейная) палетка для построения диффузионного поля.

падают с точностью до графического отображения с центрами отрезков и заметно смещаются от этих центров лишь в сравнительно больших отрезках. Для них указаны соответствующие значения $\frac{\xi'_i}{\sigma_D}$ и ξ'_i для $\sigma_D = 5$ в табл. 6.

Пользование палеткой ясно из ее построения; чтобы по заданным значениям $C_0(\xi)$ построить поле $C(x)$, образующееся к моменту t , нужно изобразить поле $C_0(\xi)$ в таком масштабе расстояний, в котором соответствующая моменту t величина $\sigma_D = \sqrt{2Dt}$ отображается отрезком, показанным на палетке (5 усл. ед.)*. Это можно представить и как изображение исходного поля в масштабе расстояний, где за единицу длины принята величина σ_D палетки (в таком же масштабе будет получено и поле $C(x)$). Затем центр палетки совмещается с точкой, где требуется узнать $C(x)$, а линия палетки располагается вдоль оси расстояний—отображения пространства точек ξ . Считываются значения $C_0(\xi'_i)$ —величины $C_0(\xi)$ исходного поля в точках, против которых оказались точки ξ'_i палетки. Искомая концентрация равна сотой доле суммы указанных значений для i от -49 до 49 плюс тысячная доля суммы остальных считанных значений.

Согласно свойству композиции диффузионных процессов, описанная палетка может быть применена для моделирования не только одномерных, но и многомерных диффузионных полей. Технически это выглядит следующим образом.

Пусть задано двумерное пространство V и исходное поле $C_0(\xi, \eta)$. В пространстве V проведем серию параллельных прямых и, рассматривая каждую из них в качестве одномерного пространства, построим для нее поле $C^{(1)}(x, y)$ так, как говорилось выше (верхний индекс здесь означает учет диффузионного процесса по одному измерению). В местах, где при переходе от одной линии к соседним поле меняется недостаточно плавно (для последующей интерполяции), проводятся дополнительные линии с применением к ним той же процедуры моделирования. Полученное в результате таких операций поле $C^{(1)}(x, y)$ представляется в виде чисел или изоконцентрат. Оно рассматривается как исходное для моделирования процесса диффузии во втором измерении с таким же применением палетки по линиям, проведенным в этом поле перпендикулярно линиям первой серии. В результате получают искомые значения $C^{(2)}(x, y) = C(x, y)$ на плоскости.

Если задано исходное поле $C_0(\xi, \eta, \zeta)$ и требуется провести моделирование трехмерной диффузии, то вычисляется поле значений $C^{(2)}(x, y, z)$ по сериям параллельных плоскостей, и это поле рассматривается как исходное для моделирования процессов диффузии в третьем измерении по линиям, перпендикулярным этим плоскостям.

Согласно количественным оценкам, приведенным при расчете палетки, можно считать, что на величину $C(x, y, z)$ существенно влияют лишь те части исходного поля, которые на чертеже удалены от точки (x, y, z) на расстояние, не превышающее полудлину палетки. Исходное поле в более далеких точках практически (с погрешностью до долей процента) не влияет на искомое значение $C(x, y, z)$ и при подсчетах соответствующей точности может не приниматься во внимание. Это существенно сокращает и облегчает необходимые вычисления.

Если исходное поле представляет собой локальный (по сравнению с σ_D) рассеивающийся объект и число точек ξ'_i палетки, попадающих в него, мало, то оценка $C(x)$ может существенно изменяться в зависимо-

*Если палетка вычерчена на непрозрачном материале, то поле изображается на прозрачной основе.

сти от случайного расположения этих точек относительно объекта. В таких случаях можно рекомендовать вместо $C_0(\xi'_i)$ использовать $\bar{C}_0(\xi)$ в (ξ_{i-1}, ξ_i) или проводить прямой расчет $C(x)$ по принципу эквивалентности.

Двумерная (круговая) палетка. Для упрощения и ускорения вычислений при моделировании двумерных и трехмерных полей создана палетка, отображающая сразу двумерную диффузию (в случае трехмерной диффузии она может применяться, на основании свойства композиции, перед или после применения одномерной палетки, отображающей диффузию по третьему измерению).

Здесь используется формула (2, § 3) для тех условий, которые были указаны при ее получении. Запишем эту формулу в полярных координатах ρ, φ с центром координат в точке (x, y) :

$$C(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_D^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty C_0(\rho, \varphi) \cdot \exp(-\rho^2/(2\sigma_D^2)) \cdot \rho \cdot d\rho \cdot d\varphi. \quad (7)$$

Пусть ρ_{i-1} и ρ_i , φ_{i-1} и φ_i — пары каких-то фиксированных значений координат. Тогда точки с координатами $\rho \in (\rho_{i-1}; \rho_i)$, $\varphi \in (\varphi_{i-1}; \varphi_i)$ составляют область, имеющую форму криволинейной трапеции. Согласно формуле (7), рассеяние вещества этой области вызывает в точке (x, y) приращение концентрации

$$\Delta C_i = \frac{1}{2\pi\sigma_D^2} \int_{\varphi_{i-1}}^{\varphi_i} \int_{\rho_{i-1}}^{\rho_i} C_0(\rho, \varphi) \cdot \exp(-\rho^2/(2\sigma_D^2)) \rho \cdot d\rho \cdot d\varphi. \quad (8)$$

Разобьем исходное пространство на такие трапеции и представим $C(x, y)$ в виде суммы значений ΔC_i .

При небольших размерах выделенной i -й трапеции можно принять величину $C(\rho, \varphi)$ внутри нее пространственно неизменной и равной концентрации в некоторой точке (ρ'_i, φ'_i) . Учитывая точность графического построения и соображения, приводившиеся при выборе точек ξ'_i в предыдущем разделе, здесь оказалось целесообразным в качестве точек (ρ'_i, φ'_i) брать точки пересечения диагоналей соответствующих трапеций.

Тогда равенство (8) после элементарных преобразований сводится к выражению

$$\Delta C_i = \frac{\Delta\varphi_i}{2\pi} (\exp(-\rho_{i-1}^2/(2\sigma_D^2)) - \exp(-\rho_i^2/(2\sigma_D^2))) \cdot C_0(\rho'_i, \varphi'_i), \quad (9)$$

где $\Delta\varphi_i = \varphi_i - \varphi_{i-1}$.

Подберем размеры трапеции так, чтобы она была приблизительно изометричной. Для этого примем длину ее средней линии, измеряемой по окружности радиусом $(\rho_{i-1} + \rho_i)/2$, равной размеру $\rho_i - \rho_{i-1}$ по радиусу палетки, т. е.

$\frac{\rho_i + \rho_{i-1}}{2} \cdot \Delta\varphi_i = \rho_i - \rho_{i-1}$, откуда

$$\Delta\varphi_i = \frac{2(\rho_i - \rho_{i-1})}{\rho_i + \rho_{i-1}}. \quad (10)$$

Согласно равенствам (9) и (10),

$$\frac{\Delta C_i}{C_0(\rho'_i, \varphi'_i)} = \frac{\rho_i - \rho_{i-1}}{\pi(\rho_i + \rho_{i-1})} \cdot (\exp(-\rho_{i-1}^2/(2\sigma_D^2)) - \exp(-\rho_i^2/(2\sigma_D^2))). \quad (11)$$

Эта формула используется для построения двумерной палетки.

Здесь оказалось удобным принять $\Delta C_i/C_0(\rho'_i, \varphi'_i) = \text{const} = 0,001$. Возьмем $\rho_0 = 0$. Тогда при принятом значении левой части равенства (11) найдем, что оно удовлетворяется при $\rho_1 = 0,079 \sigma_D$. Подставляя в (11) это значение, найдем аналогично $\rho_2 = 0,159 \sigma_D$ и т. д. * до $\rho_{22} = 3,37 \sigma_D$. Влияние на $C(x, y)$ области исходного поля, находящейся вне окружности с последним радиусом, при $C_0(\rho, \varphi) = \text{const} = C_p$ оказывается равным

$$\Delta C = \frac{C_p}{2\pi\sigma_D^2} \int_0^{2\pi} \int_{3,37\sigma_D}^{\infty} \exp(-\rho^2/(2\sigma_D^2)) \rho \cdot d\rho \cdot d\varphi = C_p \cdot \exp(-3,37^2/2) = 0,003 \cdot C_p, \quad (12)$$

и для поставленных целей им можно пренебречь.

Для каждой пары значений ρ_{i-1}, ρ_i по формуле (10) находится $\Delta\varphi_i$, а затем $n_i = \frac{2\pi}{\Delta\varphi_i}$ — число выделяемых криволинейных трапеций в i -м кольце. Округляя n_i до целого значения (с взаимной компенсацией завышений и занижений округления для разных i), получаем данные для построения палетки. Общее число трапеций на палетке при этом оказалось равным 997. Соответственно значению $\Delta C_i = 0,001 \cdot C_0(\rho'_i, \varphi'_i)$ получаем, что это число согласуется с результатом формулы (12): исключенная из рассмотрения область поля при $C_0(\rho, \varphi) = \text{const} = C_p$ создала бы в точке (x, y) приращение концентрации $\Delta C = C_p - 997 \cdot 0,001 C_p = 0,003 C_p$.

Результаты расчетов приведены в табл. 7, а соответствующая палетка — на рис. 49. Построение этой палетки в принципе аналогично предыдущей, будучи несколько сложнее лишь технически: на основании соображений удобства изображения выбирается величина σ_D , по вычисленным величинам $\frac{\rho_i}{\sigma_D}$ находятся ρ_i , чертится серия соответствующих этим радиусам окружностей и каждое полученное между ними кольцо делится радиальными линиями на целое число n_i одинаковых частей — трапеций. На пересечении диагоналей каждой трапеции ставится представляющая ее точка.

Для использования палетка или пространство, в котором моделируется диффузия, изображается на прозрачном материале. При изображении пространства, как и в одномерном случае, за единицу длины

Таблица 7

Результаты расчета двумерной палетки для построения диффузионного поля

| i | ρ_i/σ_D | n_i | Округлен- ное n_i | i | ρ_i/σ_D | n_i | Округлен- ное n_i |
|-----|-------------------|-------|------------------------|-------------|-------------------|-------|------------------------|
| 1 | 0,079 | 3,14 | 3 | 13 | 1,144 | 64,19 | 64 |
| 2 | 0,159 | 9,42 | 9 | 14 | 1,258 | 66,36 | 66 |
| 3 | 0,239 | 15,62 | 16 | 15 | 1,380 | 67,65 | 68 |
| 4 | 0,320 | 21,72 | 22 | 16 | 1,514 | 67,93 | 68 |
| 5 | 0,402 | 27,68 | 28 | 17 | 1,663 | 66,98 | 67 |
| 6 | 0,485 | 33,45 | 34 | 18 | 1,833 | 64,57 | 65 |
| 7 | 0,570 | 38,89 | 39 | 19 | 2,035 | 60,22 | 60 |
| 8 | 0,657 | 44,26 | 44 | 20 | 2,290 | 53,38 | 53 |
| 9 | 0,747 | 49,17 | 49 | 21 | 2,650 | 42,93 | 43 |
| 10 | 0,840 | 53,70 | 54 | 22 | 3,370 | 26,34 | 26 |
| 11 | 0,936 | 57,74 | 58 | | | | |
| 12 | 1,037 | 61,29 | 61 | | | | |
| | | | | Итого . . . | 996,63 | 997 | |

* Для удобства вычислений выражение (11) предварительно упрощается введением $\sigma_D = 1$ усл. ед.

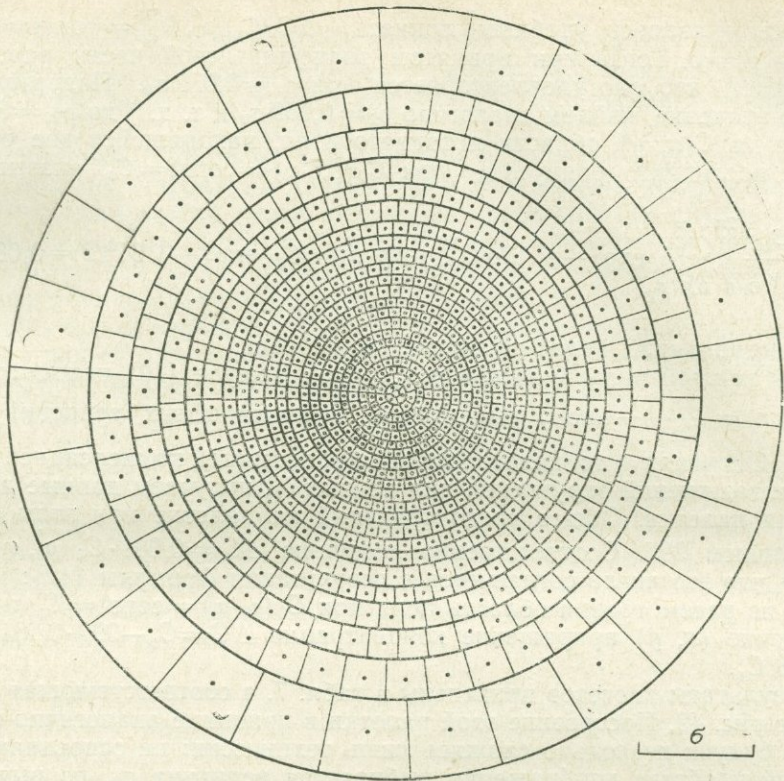


Рис. 49. Двумерная (круговая) палетка для построения диффузионного поля.

принимается величина σ_D . Чтобы найти концентрацию в некоторой точке (x, y) изучаемого пространства, центр палетки совмещается с этой точкой, а плоскость палетки — с плоскостью, на которой изображено названное пространство. Подсчитывается сумма значений концентраций исходного поля, попавших в те точки, которые представляют каждую трапецию палетки. Тысячная доля вычисленной суммы и есть искомая оценка величины $C(x, y)$.

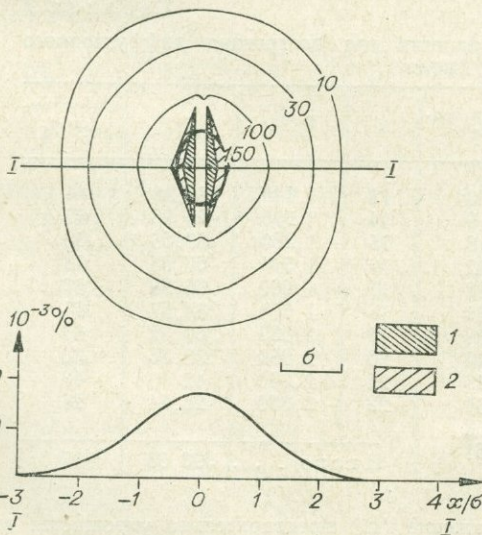


Рис. 50. План и график концентраций, построенные с помощью палетки, показанной на рис. 49.

1 — области с начальной концентрацией 2 усл. ед.; 2 — области с начальной концентрацией 1 усл. ед. На плане у изоконцентрат указаны концентрации в 10^{-3} усл. ед., образовавшиеся в результате диффузии с показанной величиной σ_D . I-I — профиль, по которому построен график концентраций в нижней части рисунка.

Для повышения точности оценки $C(x, y)$ ее можно вычислять таким образом несколько раз, поворачивая палетку каждый раз на некоторый угол, а затем вычислять среднее или медианное значение из полученных результатов. Этим сглаживается влияние ошибок, связанных со случайным попаданием точек (ρ'_i, ϕ'_i) палетки в какие-то точки исходного поля.

На рис. 50 показан пример построения поля $C(x, y)$ по заданному полю $C_0(\xi, \eta)$. Как известно, поля подобной сложности рассчитываются обычными методами с большим трудом. Применение же описанной палетки, как показал эксперимент, позволяет лаборанту без специального образования сделать это за несколько часов, включая его обучение и изготовление чертежа.

В работе (Дубов, 1969₃) было показано, что с помощью описанных палеток могут моделироваться диффузионные поля в случаях, когда пространство V неоднородно по D , т. е. D — функция координат, и имеет границы, а также при переходе вещества μ из подвижной фазы в неподвижную. Однако при наличии быстродействующих автоматических вычислительных машин моделирование в таких случаях проще проводить методом, описываемым ниже.

Композиционное моделирование*

Основы метода. В настоящее время широко известны два численных метода решения задач математической физики: метод сеток и вариационный (Березин и Жидков, 1960; Михлин, 1966). Эти методы в принципе применимы и для моделирования геохимических полей. Однако вариационный метод требует применения специфических приемов и относительно сложен даже в сравнительно простых случаях. Метод сеток проще, он позволяет единообразно решать многие задачи, если известны краевые условия и дифференциальное уравнение, описывающее изучаемый процесс. Однако вывод необходимого уравнения является во многих типичных для геохимии случаях сложной задачей с сомнительной возможностью решения. Кроме того, метод сеток в его современном виде бывает неприемлемо трудоемок, особенно при решении задач с размерностью пространства больше единицы.

Все это явилось причиной разработки описываемого ниже метода. Он использует представление изучаемых сложных процессов в виде композиции таких достаточно простых (элементарных) составляющих, для которых с нужной точностью можно применить уже известные решения. В частном случае, когда известен оператор, описывающий изучаемый процесс в целом, указанное представление можно считать расщеплением этого оператора. Но, в отличие от распространенных сейчас приемов, в данном методе обращено внимание на целесообразность расщепления по физическим причинам**. Это означает, что при выборе подоператоров, на которые производится расщепление, используются физические представления, так что каждый из этих подоператоров может отображать какое-то физическое явление. Эксперименты, проведенные автором совместно с А. Б. Вертлибом, показали, что такой подход дает возможность относительно легко найти схемы вычислений, которые хотя бы в некоторых случаях более выгодны (с учетом производительности и точности), чем общепринятые (Дубов, Вертлиб, 1966). Но главной особенностью метода является то, что он позволяет производить моделирование

* В ранних публикациях применялись также названия «метод элементарного моделирования» и «метод расщепления физических причин».

** Расщепление ряда известных операторов, выражаемых уравнениями (без деления по физическим причинам), освещается в работах Яненко (1967), Дьяконова (1967), Fairweather, Gourlay, Mitchell (1967) и др.

сложных процессов при наличии любых описаний составляющих их процессов. В том числе при отсутствии выражений, записываемых в виде традиционных формул и операторов, подвергающихся расщеплению.

Описываемый метод, как и метод сеток, использует предварительное разбиение пространства V в виде некоторой сети. Однако в методе сеток на основании исходных уравнений производится вычисление изучаемых величин для изолированных точек — узлов сети, где различные ячейки граничат своими углами. Описываемый же нами метод предусматривает вычисление изучаемых величин как результатов взаимодействия ячеек сети (точнее, порций вещества и участков поля, находящихся в определенных ячейках). Поэтому получаемые значения характеризуют не отдельные точки, а объемы ячеек. Лишь по техническим соображениям они приписываются точкам конечной совокупности — центрам соответствующих ячеек, для которых эти значения в среднем наиболее точны.

Для применения описываемого метода в простейшем варианте удобно, как и в обычном методе сеток, предварительно разбить пространство V на одинаковые параллелепипедальные ячейки с ребрами, параллельными координатным осям. Обозначим через Δx , Δy , Δz размеры ребер ячеек по соответствующим осям. Будем считать их достаточно малыми для того, чтобы изменение любого параметра или изучаемой величины внутри одной ячейки можно было принять приближенно линейным с нужной точностью. Тогда фактическое распределение значений параметров и изучаемых величин в некоторый момент времени представляется в виде поля значений в центрах ячеек. Пусть T — время, в течение которого протекает моделируемый процесс. Разобьем его на промежутки Δt_i ($i=1, 2, \dots, n$), настолько малые, что все воздействия на любую величину в любой ячейке можно считать с нужной точностью неизменными в течение любого из этих промежутков в отдельности (тогда изменение любой величины в любой ячейке за время Δt_i можно рассчитывать исходя из состояния пространства V в начале этого промежутка времени или в конце промежутка Δt_{i-1}). При моделировании многих процессов бывает удобно выбирать промежутки Δt_i достаточно малыми также для того, чтобы можно было считать с нужной точностью, что за это время влияние любой ячейки может распространяться только на непосредственно примыкающие к ней ячейки.

Изображение поля значений параметров и изучаемых величин, приписанных центрам ячеек, назовем моделью, а процесс изменения этого поля (замена значений, исходных для Δt_i , значениями, исходными для Δt_{i+1}) — работой модели. Согласно сказанному выше, работу модели можно представить в виде совокупности (сумм и композиций) операций, на которые разлагается изучаемый процесс. Результат каждой операции для каждой изменяемой величины может рассчитываться для каждой ячейки в предположении неизменности остальных величин во всех ячейках в промежутке времени Δt_i по состоянию модели, исходному для этого промежутка. Результат операции должен относиться к концу Δt_i , чтобы при проведении всех нужных операций во всех ячейках получить состояние модели, исходное для Δt_{i+1} . Поэтому все операции повторяются столько раз, каково число промежутков времени, при которых производятся соответствующие изменения модели. Совокупность операций, выполняемых для Δt_i , назовем i -м циклом работы модели. В зависимости от быстроты и характера изменений различных величин может быть целесообразным комбинирование циклов с разными операциями в новые циклы. Момент окончания работы модели может устанавливаться по приобретению моделью определенного свойства или по выполнению определенного числа циклов.

Размеры модели определяются размерами той части пространства V , где требуется получить результативное поле, и областями, существенно влияющими на эту часть в течение времени T . В частности, с доста-

точной для многих целей точно можно считать существенным диффузионное поступление вещества из областей, отстоящих на расстояние не более $3 \div 3,5 \sigma_D$ от точек, где необходимо вычислить значение $C(r)$. Наличие источников μ может увеличить это расстояние, поглощение же μ неподвижной фазой уменьшает его.

Сказанное позволяет моделировать процессы в пространстве V , слишком большом для полного отображения моделью, в том числе в бесконечном пространстве. Для этого при отображении в модели отбрасываются те части пространства V , которые заведомо не содержат областей, существенно влияющих на $C(r)$, и точек, где нужно узнать $C(r)$. Границы части пространства V , отображаемой в модели, могут быть приняты любыми, удобными для работы модели: их расстояние от области, где нужно узнать $C(r)$, можно сделать достаточно большим, чтобы пренебречь их влиянием.

Наглядно проиллюстрируем изложенное на конкретных вариантах.

В тех случаях, когда это не может привести к путанице, моделируемые объекты и их модельные отображения будем называть для краткости одинаково по названиям этих объектов, т. е. отображение рудного тела в модели будем называть рудным телом и т. п.

Весьма наглядно алгоритм использования описываемого метода можно представить для случая, когда моделью служит двумерный чертеж.

1. Вычерчивается представляемая в модели часть V' пространства V и разбивается двумя сериями линий на прямоугольные ячейки (с аппроксимацией кривых линий ступенчатыми).

2. Центру каждой ячейки приписываются исходные значения изменяющихся величин, соответствующие этой точке.

3. Последовательно для каждой ячейки выполняется очередной (i -й) цикл работы модели: для заданных на начало цикла значений поля заданными операциями вычисляются его изменения за Δt_i (для всех изменяющихся величин).

4. Вместо записанных ранее значений поля записываются новые.

5. Если заданный признак конца работы не появился, возврат к позиции 3; в противном случае работа модели закончена и полученное поле есть ее результат.

В частности, при фильтрации вдоль оси Ox , если изменяются от ячейки к ячейке величины $C_{ж}$ и $C_{т}$, а величины κ , β и U неизменны, то центру каждой ячейки приписываются соответствующие значения первых двух величин, а κ , β и U — параметры, общие для всего пространства V' . Цикл работы модели для каждой (j -й) ячейки состоит из операций:

1. Перенос записей $C_{жj}$ в ячейку с номером $j+k$, где k — число ячеек, проходимых фильтрационным потоком за время Δt_i в соответствующем направлении при заданной скорости U .

2. Учет поглощения — вычисление для перенесенных значений величин $\Delta C_{ж} = -\kappa \cdot C_{ж} \cdot \Delta t_i$, $\Delta C_{т} = \frac{\beta \kappa}{1-\beta} \cdot C_{ж} \cdot \Delta t_i$ и прибавление их соответственно к концентрациям $C_{ж}$ (перенесенной из ячейки $j-k$) и $C_{т}$ (не перемещаемой).

3. Запись полученных сумм вместо записанных ранее для этой ячейки значений $C_{ж}$ и $C_{т}$.

Если же в зависимости от $C_{т}$ меняется значение и коэффициента поглощения, то для каждой ячейки в цикле работы модели записывается также значение κ , и т. п.

Если наряду с фильтрацией имеется также диффузия, то к приведенной схеме добавляется операция вычисления количества вещества, переносимого диффузией за время Δt_i через границы ячеек в направлениях координатных осей:

$$\Delta_i m = -D \frac{\Delta_n C_{ж}}{\Delta n} \cdot \Delta S \cdot \Delta t_i, \quad (13)$$

где D — коэффициент диффузии; Δn — расстояние между центрами ячеек, разделенными рассматриваемой границей; $\Delta n C_{ж}$ — разность между концентрациями в жидкой фазе в этих центрах (эта разность отрицательна, если в направлении соответствующей координатной оси величина $C_{ж}$ убывает); ΔS — площадь поверхности рассматриваемой границы ячеек.

Сложив величины Δn для всех границ рассматриваемой ячейки и поделив полученную сумму на объем ячейки, равный $\Delta n \cdot \Delta S$, узнаем изменение концентрации в жидкой фазе i -й ячейки, вызванное диффузией.

Принимая за единицу длины величину $\Delta n = \Delta x = \Delta y = \Delta z$, а за единицу времени Δt , одинаковые для всего пространства V' , получаем удобные формулы для вычислений. Разумеется, при этом должны быть вычислены в новых единицах и параметры, в размерность которых входят длина и время (D , κ и др.). После же моделирования необходимо обратное преобразование к общепринятым системам единиц измерений.

При некоторых условиях (например, при вычислениях с помощью автоматических машин и необходимости экономии памяти, занимаемой ячейками модели) может оказаться выгодным разбиение пространства V' и на неравные ячейки, относительно малые лишь в областях, близких к той части V' , поле в которой изучается. В далеких же от этой части областях ячейки могут быть более крупными, как было сделано на описанных выше палетках. Возникающие при этом трудности из-за сложности конфигурации ячеек могут быть преодолены аналогично тому, как это делается в обычном методе сеток (Годунов, Прокопьев, 1968).

Проиллюстрируем описанный метод на сильно упрощенной для наглядности модели образования остаточного ореола (подобная, но более сложная и близкая к действительности модель используется в следующем разделе для решения важной геохимической задачи по изучению элювиально-делювиальных ореолов).

Пусть $\Delta x = \Delta y = \text{const} = 1$ усл. ед.; размер по вертикали слоя, в котором идет диффузия (мощность элювия — делювия), $H_D = 2$ усл. ед.; мощность рудного тела $2p_x = H_p = 1$ усл. ед. (рис. 51).

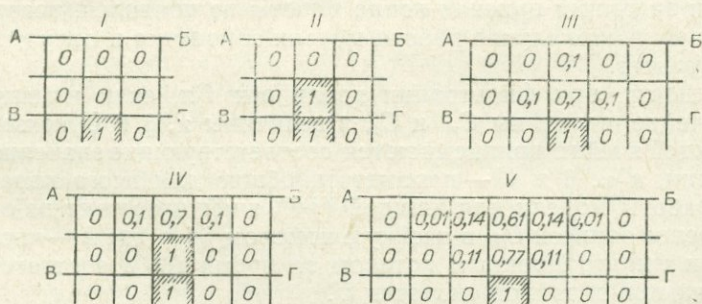


Рис. 51. Изменение концентраций рудного вещества в простейшей модели остаточного ореола с $D=0,1$ усл. ед. во всем разрезе рыхлых образований.

АБ и ВГ — соответственно верхняя и нижняя границы рыхлых образований. Первый элементарный цикл: I — исходное положение; II — результат опускания поверхностей АБ и ВГ относительно разреза; III — результат диффузии. Второй элементарный цикл: IV — результат опускания поверхностей АБ и ВГ относительно разреза; V — результат диффузии.

Процесс образования элювия — делювия будем считать установившимся: насколько в результате эрозии и денудации понижается АБ — верхняя граница рыхлых пород, настолько в результате гипергенного разрушения коренных пород опускается ВГ — их нижняя граница. Величину снижения этих границ за время $\Delta t = \text{const} = 1$ усл. ед. примем равной $\Delta H_D = 1$ усл. ед. Коэффициент диффузии между границами АБ и ВГ примем равным $D=0,1$ усл. ед. Диффузионный процесс в коренных породах будем считать гораздо более слабым, чем в рыхлых, и поэтому ниже линии ВГ примем $D=0$.

Пусть к началу работы модели рудное тело выходит под рыхлые образования, но они еще не содержат рудного материала (рис. 51, I). В качестве первой операции (P_1) элементарного цикла примем отображение эрозии, т. е. понижения границ АБ и ВГ. Оно эквивалентно перемещению остального изображения вверх относительно этих границ. При этом верхний слой ячеек рыхлых образований переходит границу АБ и «сносится»; слой, бывший нижним, оказывается непосредственно под АБ, а его место над ВГ занимает тот слой, который был ранее под ВГ. Поэтому теперь над ВГ появляется концентрация 1 (рис. 51, II). (Здесь мы используем упоминавшуюся возможность описания операции без выражения ее формулой традиционного вида, требуемой в прежних методах моделирования подобных процессов.)

Второй операцией (P_2) отобразим диффузию. Эту операцию разложим на сумму операций, отображающих диффузию через каждую из границ очередной рассматриваемой ячейки:

$$\Delta_i m = -D \cdot \frac{\Delta_n C}{\Delta n} \cdot \Delta S \cdot \Delta t.$$

(В данном случае величина $\Delta_i m$ численно равна $-D \cdot \Delta_n C$, поскольку остальные сомножители и делитель равны единице.)

В качестве $\Delta_n C$ будем брать то значение, которое имеется к началу действия P_2 . Вычислим сумму таких $\Delta_i m$ для каждой ячейки между границами АБ и ВГ при учете, что диффузия через эти границы отсутствует, и найдем соответствующие изменения концентраций, численно равные названным суммам, поскольку объем каждой ячейки $\Delta V = 1$. Учитывая эти изменения, найдем концентрации, образующиеся к концу первого цикла (рис. 51, III). Как видим, из средней ячейки нижнего слоя рыхлых образований часть диффундирующего вещества перешла в три соседние ячейки, повысив в них концентрацию с 0 до 0,1, что уменьшило концентрацию в исходной ячейке на 0,3.

После этого начинается второй элементарный цикл. Первая его операция — понижение границ рыхлых образований на ΔH_D и денудация слоя, оказавшегося выше АБ, — приводит к картине, показанной на рис. 51, IV. Диффузия в этом цикле вызывает распределение концентраций, показанное на рис. 51, V, и т. д.

Заметим, что в обычном методе сеток подобная задача решалась бы путем сведения к конечным разностям второго уравнения Фика вида

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right),$$

содержащего вторые производные.

Равенство же (13), положенное в основу описанного решения, является конечно-разностным выражением уравнения $d_i m = -D \cdot \frac{\partial C}{\partial n} \cdot dS \cdot dt$,

содержащего только первую производную. Такое снижение порядка аппроксимируемых производных приводит к существенному упрощению вычислений и снижению необходимого числа ячеек: для вычисления оценки второй производной (по вторым разностям) на каком-либо участке поля необходимы три смежные ячейки, чтобы иметь два промежутка между значениями C , по которым вычисляется производная; при вычислении же оценки первой производной необходимы только две такие ячейки с одним промежутком между заданными значениями C (для вычисления первой разности). При вычислении вторых разностей по некоторым схемам получается модель, неустойчивая к ошибкам (Березин, Жидков, 1960), что может приводить к ошибкам в обычном методе сеток. Ограничение вычислений первыми разностями при использовании описываемого метода освобождает от таких ошибок.

Обоснование этого метода базируется на тех же положениях, что и обоснование метода сеток,— на возможности аппроксимации дифференциалов конечными разностями.

Точность метода, согласно этим положениям, растет с уменьшением размеров ячеек используемой модельной сети и величины Δt , причем всегда величина Δt должна быть такой, чтобы изменения, происходящие в ячейках за один элементарный цикл, были малы по сравнению с исходными для него значениями изменяющихся величин. Повторяя работу модели при неизменных размерах ячеек, но уменьшающихся значениях Δt и сопоставляя получаемые результаты, можно прекратить вычисления, когда это уменьшение перестанет давать существенные изменения результатов. Производя такую операцию для разных размеров ячеек, можно выбрать все параметры модели, требующиеся для получения результатов с достаточно малой вероятной ошибкой.

Для начала следует учесть, что обычно размеры ячеек должны быть такими, чтобы по каждой координатной оси модели было не менее 10 ячеек. Значение Δt должно быть обычно таким, чтобы за каждый цикл изменение каждой из изучаемых величин в любой ячейке не превышало доли, равной 0,1 от возможного изменения этой величины. Для этого, в частности, после упомянувшегося принятия за единицу величин Δt , Δx , Δy , Δz пересчитанные величины D и κ должны быть не более 0,1. Вычисления, проведенные для максимальных из указанных размеров ячеек и интервалов Δt , в рассматриваемых нами случаях дали точность, нужную для приводимых здесь графических иллюстраций. Поэтому такие размеры можно рекомендовать в качестве первого приближения.

Примеры применения. Рассмотрим важный для теории и практики геохимических съемок вопрос о влиянии вертикального диффузионного перемешивания материала рыхлых пород на распределение концентраций μ в верхнем горизонте элювия — делювия*. Этот вопрос имеет большое значение, поскольку при наиболее распространенном сейчас методе геохимических съемок пробы отбираются из названного горизонта без дорогостоящего изучения распределения концентраций по глубине.

Рассмотрение проведем для случая, когда вещество μ в элювии — делювии связано с частицами рыхлых образований (включающих обломки рудных тел), и коэффициент диффузии для μ есть коэффициент диффузии этих частиц. Хаотические (диффузионные) перемещения несвязанных частиц рыхлого материала происходят из-за неравномерности их прогрева и охлаждения, различий в тепловых свойствах, в результате действия разных случайных факторов. Согласно общим представлениям статистической физики, эти перемещения в среднем уменьшаются с увеличением размеров частиц.

Размеры частиц рыхлых образований, как известно, в среднем увеличиваются в направлении от земной поверхности к коренным породам, т. е. с увеличением глубины D преимущественно убывает.

Обозначим: h — глубина, отсчитываемая от земной поверхности (верхней поверхности рыхлых пород); H_D — мощность рыхлых пород; ΔH_D — мощность слоя рыхлых пород, денудированного (сносимого водными потоками, ветром и т. д.) за время Δt , принимаемое в качестве продолжительности цикла работы модели; T — время, в течение которого верхняя поверхность рыхлых пород опустится в результате денудации на интервал H_D ; D_s — величина D в верхнем горизонте рыхлых образований; r — полумощность рудного тела — вертикального пласта бесконечной протяженности; C_p — концентрация μ в нем; фоновую концентрацию в коренных и рыхлых породах принимаем нулевой.

* Точнее говоря, речь идет о перемешивании материала в направлении, перпендикулярном земной поверхности; только для краткости мы называем это направление вертикальным.

Рыхлые образования будем считать элювиально-делювиальными, расположенными на плоском склоне. Для изучения влияния только диффузионного перемешивания частиц будем полагать, что направленное гравитационное сползание рыхлых пород по склону отсутствует. Поэтому их границы представим для удобства изображения горизонтальными параллельными плоскостями. Для рассматриваемых примеров ограничимся случаем, когда снижение верхней границы рыхлых пород денудацией вызывает такое же снижение их нижней границы за счет разрушения коренных пород воздействующими на них гипергенными факторами, т. е. $H_D = \text{const}(t)$. Гравитационную дифференциацию материала рыхлых пород будем считать отсутствующей. В частности, ею, как известно, можно пренебречь для многих практически важных целей при рассмотрении рыхлых образований на месторождениях свинцовых охр, любых тонко распыленных в кварце минералов, например молибдена, и др.

Поверхность опробования будем считать плоскостью, параллельной граничным плоскостям рыхлых образований и относительно близкой к верхней из них, как это обычно и бывает в действительности при так называемых металлометрических съемках. Заражение проб аллохтонным материалом, приносимым в верхний горизонт элювия — делювия водными потоками, осыпями и другими способами, будем считать пренебрежимо малым. Наблюдаемые при таких условиях вторичные ореолы рудных тел, залегающих в коренных породах, теперь принято называть остаточными.

Перечисленные обозначения и характеристики задают моделируемые условия. Заметим, что в качестве начального может быть принято любое состояние формирующегося остаточного ореола: работа модели продолжается до установления стационарной картины поля концентраций, зависящей лишь от распределения $D = D(h)$, от соотношения σ_s/H_D (где $\sigma_s = \sqrt{2D_s t}$) и от величин p и C_p .

Значения C_p при прочих равных условиях, пропорциональны величине C_p . Поэтому для общего изучения относительных изменений этих значений в зависимости от различных факторов удобно и достаточно провести вычисления при $C_p = 1$ усл. ед.

Каждый цикл действия модели состоит из двух операций: снижение границ рыхлых образований на величину H_D и диффузия, как было описано в предыдущем разделе для упрощенной модели (отличие от нее сейчас заключается лишь в увеличении количества ячеек и числа циклов работы модели с соблюдением необходимых условий малости размеров ячеек и Δt).

На рис. 52 показан полученный вертикальный разрез через ореол рассматриваемого типа при пренебрежимо малом изменении D с глубиной, т. е. при модели с $D = \text{const}(h)$.

На рис. 53 показан для сравнения разрез, полученный при одном отличии от предыдущего; здесь диффузия по вертикали предполагалась отсутствующей.

Относительное различие максимальных концентраций (C_s) в результирующем поле этих двух моделей составляет лишь доли процента. В удаленных от максимума точках, где концентрации падают примерно до 0,001 C_s , расхождение достигает 20—30% C_s , но в связи с уменьшением абсолютных значений концентраций это расхождение в арифметическом масштабе незаметно.

Для этих моделей $\sigma_s/H_D = 0,14$. Фактические значения отношения σ_s/H_D на изучавшихся месторождениях обычно во много раз больше (часто они больше десяти). Увеличение же σ_s/H_D приводит к уменьшению влияния вертикальной диффузии на распределение концентраций по поверхности опробования. Действительно, если $\sigma_s \gg H_D$, то величиной H_D можно пренебречь по сравнению с σ_s и считать диффузию идущей только

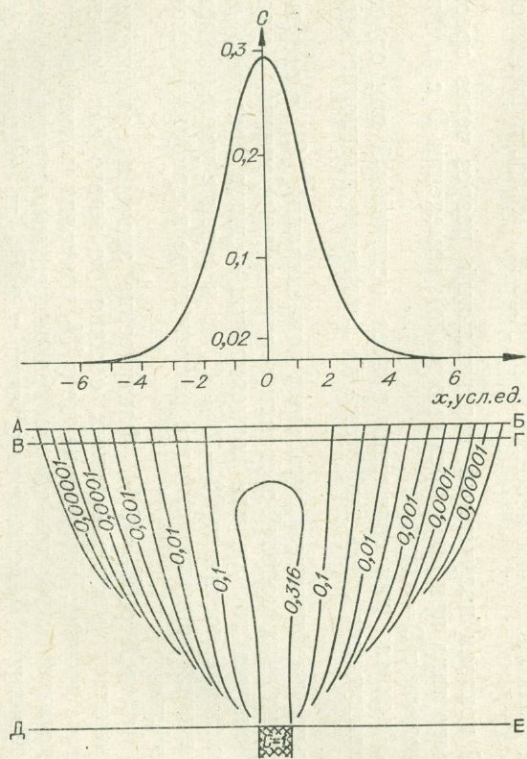


Рис. 52. Модель остаточного ореола при двумерной диффузии (в горизонтальном и вертикальном направлениях) с $D=0,1$ усл. ед. во всем разрезе рыхлых образований.

АВ — верхняя граница рыхлых образований; ВГ — поверхность опробования, по которой построен график концентраций C ; ДЕ — поверхность раздела рыхлых образований и коренных пород; $H_D = 10 \cdot \Delta H_D$

$$= 10 \text{ усл. ед.}; 2D \rho = 1 \text{ усл. ед.}; \frac{\Delta H_D}{\Delta t} = 1 \text{ усл. ед.}$$

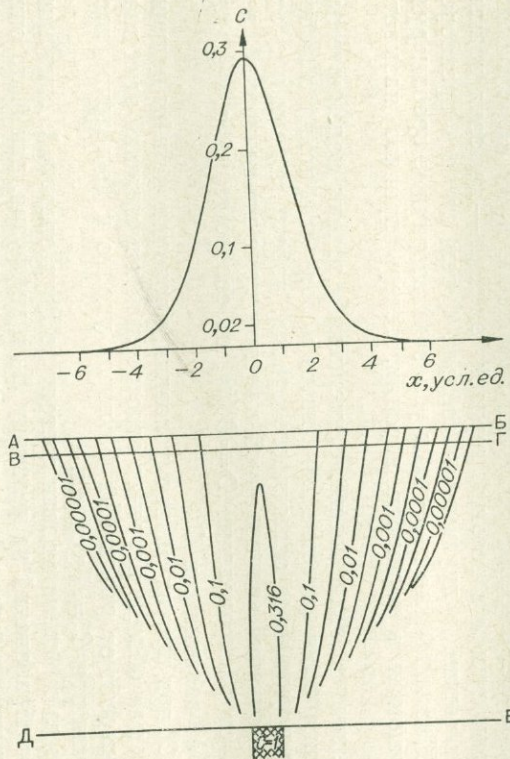


Рис. 53. Модель остаточного ореола при одномерной диффузии (в горизонтальном направлении). Условные обозначения см. на рис. 52.

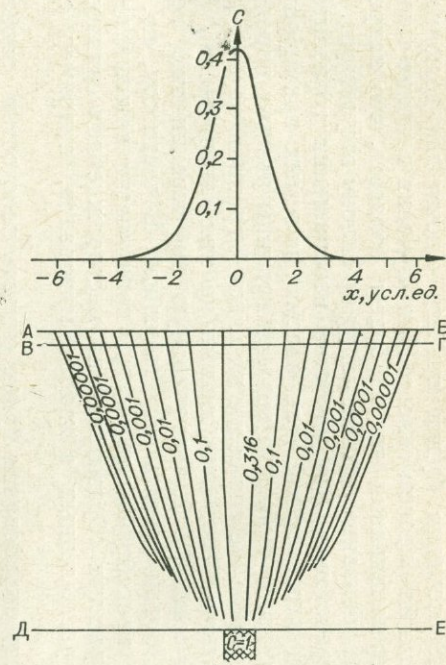


Рис. 54. Модель остаточного ореола при двумерной диффузии (в горизонтальном и вертикальном направлениях) с $D = (0,005 + 0,01 H)$ усл. ед. Условные обозначения см. на рис. 52.

по поверхности опробования, так как тогда пути, проходимые частицами параллельно этой поверхности, во много раз больше путей, проходимых в перпендикулярном ей направлении и ограниченных величиной H_D .

Изменение принятой на моделях величины p (по отношению к σ_s) в сторону уменьшения не может существенно изменить сделанных выводов, так как при этом величина p переходит в область действия принципа эквивалентности. Увеличение же p может лишь уменьшить влияние вертикальной диффузии на распределение концентраций по поверхности опробования. В частности, при $p \gg \sigma_s$, как при наличии вертикальной диффузии, так и при ее отсутствии, над рудным телом должны наблюдаться концентрации $C \approx C_D$, так как при этом практически весь материал рудного тела остается над ним.

Таким образом, в первом приближении для реальных условий вертикальным диффузионным перемешиванием элювиально-делювиального материала с $D = \text{const}(h)$ при рассмотрении концентрации на поверхности опробования остаточных ореолов можно пренебречь.

Рассмотрим теперь случай существенного убывания D с глубиной. Для этого была создана модель с линейным уменьшением $D = D(h)$ без изменения всех остальных параметров. Результаты работы этой модели показаны на рис. 54. Кроме того, была создана модель, отличающаяся от этой лишь отсутствием вертикальной диффузии. Она дала результаты, с точностью до графического построения совпадающие с показанными на рис. 54 во всем разрезе (поэтому она не иллюстрируется отдельным рисунком). То есть здесь наличие или отсутствие вертикального перемешивания не отражается существенно на результатах.

Таким образом, уменьшение D с глубиной ослабляет влияние вертикального диффузионного перемешивания на распределение концентраций по поверхности опробования, что можно объяснить уменьшением обмена частицами верхних горизонтов рыхлых пород с нижними.

Объединяя полученные выводы, можно сказать, что в заведомо довольно широко распространенных случаях можно рассчитывать концентрации на поверхности опробования остаточных ореолов крутопадающих тел, пренебрегая диффузией в направлении, перпендикулярном границам элювия — делювия. Этот вывод относится к изученным случаям $\sigma_s/H_D > 0,14$ без учета влияния гравитационного сползания элювия — делювия и гравитационной дифференциации рыхлого материала.

Сказанное означает, что при оговоренных условиях распределение концентраций на поверхности опробования можно рассчитывать так, будто мы наблюдаем поле концентраций в тонком, параллельном этой поверхности изолированном слое рыхлых пород, существующем в течение времени T и удаляющемся от поверхности коренных пород со скоростью, равной $\Delta H_D/\Delta t$. В каждый момент времени коэффициент диффузии в этом слое определяется соответствующей величиной h . Поэтому распределение частиц μ на поверхности опробования оказывается таким, каким оно было бы при диффузии за время T в однородном слое с постоянным (эффективным) значением $D = D_0$, равным среднему значению $D(h)$ в рассматриваемом разрезе:

$$D_0 = \frac{1}{H_D} \int_0^{H_D} D(h) dh.$$

Описанные закономерности дают возможность рассчитывать теоретические кривые распределения концентраций по поверхности опробования для распространенного практически важного класса ореолов, пренебрегая диффузией в направлении, перпендикулярном этой поверхности.

Рассмотрим еще один пример — моделирование диффузионного процесса при коэффициентах диффузии и поглощения, переменных в пространстве.

Пусть V — одномерное пространство, в котором имеются подвижная и неподвижная фазы, причем первая занимает долю пространства, равную β . В качестве краевых условий примем: $C_{ж}(x)|_{x=x_n}^{t>0} = \text{const} = C_{ож}$, $C_{ж}(x)|_{x>x_n}^{t=0} = C_{т}(x)|_{x>x_n}^{t=0} = 0$; требуется найти $C_{ж}(x)$ и $C_{т}(x)$ для $x, t > 0$

при $D = A\sqrt{\tau}$, $\kappa = K(\tau_n - \tau)$, $\tau = g_{\tau}(x - x_n)$, где A и K — задаваемые коэффициенты, τ — температура в рассматриваемой точке, τ_n — температура в точке инверсии, g_{τ} — градиент температуры (в расчете на единицу длины, равную длине ячейки модели).

В этом случае рабочее поле модели представляется в виде совокупности следующих друг за другом ячеек. Пусть крайней левой из них присвоен номер 0 и предполагается, что точка инверсии (x_n) находится в ее центре. Этой точке приписывается $C_{ж} = C_{ож}$ и температура τ_n . Центрам следующих ячеек (точкам x_i) приписываются $C_{ж} = 0$ и значения τ в соответствии с выражением $\tau_i = g_{\tau} \cdot (x_i - x_n)$. Соответственно записанной величине τ_i , центру каждой ячейки придаются и значения $D_i = A \cdot \sqrt{\tau_i}$, $\kappa_i = K \cdot (\tau_n - \tau_i)$. Далее производится работа модели. В каждом цикле выполняются операции, отражающие следующие процессы:

1. Диффузия через каждую границу между ячейками. За величину коэффициента диффузии в этой операции принимается среднее из значений D в смежных ячейках. В остальном операция не имеет отличий от аналогичных, описанных выше. В результате получаются новые значения $C_{жи}$.

2. Поглощение: соответственно величинам τ_i каждой ячейки производится уменьшение $C_{жи}$ на величину $\kappa_i \cdot C_{жи}$ и увеличение $C_{ти}$ на величину $\frac{\beta}{1-\beta} \cdot \kappa_i \cdot C_{жи}$.

3. Восстановление записи $C_{ож}$ в нулевой ячейке.

На рис. 47 показано распределение концентраций, построенное по такому алгоритму (кривая 5), при $\beta = 1/2$, $C_{ож} = 0,678 \cdot 10^{-4}\%$, $g_{\tau} = -73,8^{\circ}$ на длину ячейки математической модели (или $-11,84$ на сантиметр физической модели). Число ячеек математической модели $m = 10$, длительность ее работы $n = 100$ циклов. Найденные подбором оптимальные величины τ_n , A , K указаны в подписи к рисунку.

Полученная картина распределения μ соответствует оптимальной аппроксимации показанной на рисунке кривой распределения ртути в описывавшемся выше физическом эксперименте (оптимальность здесь понимается в смысле, указанном в алгоритмах аппроксимации и в принципах решения обратной задачи (см. § 4 гл. I и § 1 гл. V)). Это означает, что выражение параметров D и κ использованными в модели упрощенными формулами достаточно для описания результатов, полученных в физическом эксперименте (при достигнутой в нем точности результатов).

Подобным образом, с представлением в виде композиции простых операторов, моделировались и другие сложные процессы, в частности сопровождающиеся изменениями химического потенциала (Дубов, 1971₃).

§ 6. ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ВЕЩЕСТВА ПО ФРАКЦИЯМ В РЫХЛОМ ПОКРОВЕ

При наиболее распространенных сейчас геохимических исследованиях — так называемых металлотрических съемках — необходимо судить о распределении μ в верхнем горизонте рыхлых пород по результатам опробования определенного (находящегося на заданной глубине) горизонта рыхлых образований. При этом в пробы берется лишь мелкая фракция, обычно меньше 1 мм. Поэтому необходимо учитывать возможность обогащения или обеднения такой фракции элементом μ в результате гипергенных процессов перераспределения вещества.

В простейшем случае можно представить, что в отбираемую фракцию с диаметром частиц от некоторого значения δ (принимаемого обычно нулевым) до $\delta + \Delta\delta$ (имеющего обычно порядок 0,5—1 мм) переходит определенная доля $P_\mu(\delta, \delta + \Delta\delta)$ вещества μ , содержащегося в соответствующем месте рыхлых пород. Тогда, получив распределение концентраций $C(r)$ в рыхлых образованиях на основании описанных выше положений, мы можем перейти к концентрациям $C_d(r)$, которые должны наблюдаться в отбираемой фракции, по очевидной формуле:

$$C_d(r) = k_d \cdot C(r). \quad (1)$$

Здесь $k_d = P_\mu(\delta, \delta + \Delta\delta) / P(\delta, \delta + \Delta\delta)$; $P(\delta, \delta + \Delta\delta)$ — доля объема, занимаемая отбираемой фракцией в рассматриваемых рыхлых образованиях. Иногда удобно пользоваться величиной $k_h = 1/k_d$.

Формула (1) согласуется с ранними представлениями о механизме формирования геохимических ореолов (Соловов, 1959; Дубов, 1956, 1957; Дубов, Квятковский, 1961). Как показал большой опыт, она удовлетворительна для современных требований практики при исследованиях ореолов, где закономерности распределения вещества μ по фракциям примерно одинаковы в пределах изучаемой части аномалии.

В потоках же рассеяния происходит заведомо существенное изменение распределения вещества по фракциям в наблюдаемой части аномалии с удалением от искомым объектов хотя бы потому, что на протяжении этих аномалий заметно уменьшается диаметр частиц рыхлых образований. Такое уменьшение хорошо известно, в частности, для речных отложений. В шлейфах, образуемых осыпями и временными водотоками на вогнутых склонах, по мере движения вниз уменьшается движущая сила потока из-за уменьшения крутизны склона, и из потока выпадают, задерживаясь на склоне все более мелкие частицы.

Рассмотрим основной вид потоков — аллювиальные потоки рудообразующих элементов (в известном смысле им подобны и некоторые другие потоки).

При движении рыхлого материала в таком потоке происходит истирание частиц и поступление со склонов в поток нового, еще не истертого материала. Поэтому по мере удаления от месторождения наиболее обогащенная рудообразующим элементом μ фракция потока уменьшает свой средний диаметр, и вначале она может относительно мало попадать в пробу, отбираемую из мелкой фракции, а потом ее доля повышается. Следовательно, максимум концентраций μ в пробах может сдвигаться вниз по потоку от того места, где в действительности поступление рудного материала в поток максимально. Чем мельче фракция, отбираемая в пробу, и чем прочнее рудный материал, тем больше, очевидно, такой сдвиг при прочих равных условиях.

Мы сейчас не можем останавливаться на детальном строгом рассмотрении всех явлений, определяющих распределение вещества в потоке. Остановимся лишь на одном — на влиянии различия в скорости переноса потоком частиц разных диаметров. Это различие приводит к несоответствию соотношения фракций в пробах из потока действительному соотношению их в потоке и потому должно учитываться при дальнейших теоретических исследованиях.

Для простоты будем полагать (как это обычно делается на практике), что в поперечном сечении поток однороден. Кроме того, вначале будем считать, что в пробы отбирается весь материал потока (без обычной преимущественности выборки каких-либо фракций) и что скорость частиц в потоке $U = U(\delta)$ зависит только от их диаметра.

Пусть dS — мысленно выделенная площадка в некотором поперечном сечении потока около точки r ; $dP^*(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2)$ — доля объема материала аллювия, находящегося в частицах с диаметром из интервала $(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2)$, в пробе, отобранной около точки r .

Статистическое распределение по диаметрам частиц, пересекающих площадку, в каждый момент времени такое же, как в пробе. Следовательно, доля площадки, пересекаемая частицами с диаметром из интервала $(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2)$, также равна $dP^*(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2)$. За время dt через площадку пройдет объем такого материала, равный $U(\delta) \cdot dP^*(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2) \cdot dS \cdot dt$. Общий объем материала, проходящий за время dt через dS , равен $\int_{\delta} U(\delta) \cdot dP^*(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2) \cdot dS \cdot dt$,

где интегрирование производится по всем возможным значениям δ . Следовательно, в общем объеме материала, переносимого потоком через площадку dS , материал с диаметром частиц из интервала $(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2)$ составляет долю

$$dP(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2) = \frac{U(\delta) \cdot dP^*(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2)}{\int_{\delta} U(\delta) \cdot dP^*(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2)}. \quad (2)$$

В знаменателе этого выражения стоит общее количество q материала, переносимое потоком через единичную площадку поперечного сечения. Поэтому выражение (2) можно записать также в виде:

$$dP(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2) = \frac{U(\delta)}{q} \cdot dP^*(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2). \quad (3)$$

Пусть C_{δ} — концентрация μ во фракции с диаметром частиц δ . Тогда, умножая равенство (3) на C_{δ} и интегрируя по δ от 0 до ∞ , получим среднюю концентрацию μ во всем материале, переносимом потоком через поперечное сечение:

$$\begin{aligned} C(r) &= \int_0^{\infty} C_{\delta} \cdot dP(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2) = \\ &= \frac{1}{q} \int_0^{\infty} U(\delta) \cdot C_{\delta} \cdot dP^*(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2). \end{aligned} \quad (4)$$

Концентрация же в отобранной пробе определяется выражением

$$C^*(r) = \int_0^{\infty} C_{\delta} \cdot dP^*(\delta - d\delta/2; \delta + d\delta/2). \quad (5)$$

(это средневзвешенное значение из концентраций μ в различных фракциях пробы). Из сравнения выражений (4) и (5) видно, что величины $C^*(r)$ и $C(r)$ могут сильно различаться за счет различия величины $U(\delta)$ для разных фракций. Действительно, величина $U(\delta)$ может отличаться для разных δ в любое число раз: очень крупные обломки практически неподвижны, т. е. для них $U(\delta) \approx 0$, а тонкая взвесь частиц движется со скоростью воды. Поэтому доля мелкой фракции в пробе меньше, чем в действительности в потоке. Уже простое визуальное наблюдение за потоками показывает, что даже среди частиц диаметром меньше 1 мм обычные различия скоростей в десятки раз (частицы диаметром порядка нескольких десятых долей миллиметра перекачиваются по дну значительно медленнее движения воды, в то время как более мелкие частицы взвешены в воде и имеют ее скорость). Согласно формуле (3), это нарушает в соответствующее число раз и соотношение фракций с разными диаметрами δ_1 и δ_2 в пробе по сравнению с их действительным соотношением в потоке:

$$\frac{P^*(\delta_1 - d\delta/2; \delta_1 + d\delta/2)}{P^*(\delta_2 - d\delta/2; \delta_2 + d\delta/2)} = \frac{U(\delta_2)}{U(\delta_1)} \cdot \frac{P(\delta_1 - d\delta/2; \delta_1 + d\delta/2)}{P(\delta_2 - d\delta/2; \delta_2 + d\delta/2)}. \quad (6)$$

Распределению μ по фракциям рыхлых образований уделялось довольно много внимания (Дубов, 1956, 1957; Соловов, 1959; Дубов, Квятковский, 1961; Крицук, Квятковский, 1966; Дубов, Фурсов, 1966; и др.), но теоретический анализ вскрытых явлений в упомянутых работах не делался, в связи с чем описанные источники искажений оказались неизученными. Согласно этим работам, концентрации рудообразующих элементов в различных фракциях могут различаться во много раз. Это означает, по формулам (3—6), что величина концентрации $C^*(r)$, наблюдаемая в пробах, может существенно отличаться от концентрации $C(r)$, отражающей действительное количество вещества μ в потоке, причем это отличие меняется вдоль потока из-за изменения скорости. Другие факторы, в частности изменение диаметров частиц рыхлых образований вдоль потока, могут еще более увеличивать отличие $C^*(r)$ от $C(r)$, и их следовало бы подвергнуть более детальному анализу.

Величина $C(r)$ считается пропорциональной и обычно приближенно равной средней концентрации элемента μ на площади водосбора $S(r)$, с которой поступает материал в точку r потока (Соловов, 1959; Соловов, Кунин, 1960):

$$C(r) = \frac{k}{S(r)} \int_{S(r)} C(\rho) \cdot dS, \quad (7)$$

где k — коэффициент пропорциональности, принимавшийся априори постоянным (≈ 1) для всего потока и даже региона.

Это представление сыграло большую роль в развитии поисков месторождений по аллювиальным потокам. В то же время, согласно изложенному выше, целесообразно уточнение этого представления, в первую очередь относительно изменчивости величины k .

Вопрос о поправках на гипергенные изменения в различных природных условиях должен войти, очевидно, в науку о геохимических ландшафтах, успешно изучающую эти условия (Перельман, 1955, 1968, и др.), но пока ограничивающуюся незначительными выводами.

Глава V

РЕШЕНИЕ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ (ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ)

§ 1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Оценка начального пространственного распределения и процессов его преобразования

В данной главе рассматривается специфическая аппроксимация наблюдаемых геохимических полей функциями, отображающими физическую сущность процессов образования этих полей. Аппроксимирующая функция представляется здесь функционалом в общем виде следующим образом:

$$\varphi(r) = F\{\Phi_0(\rho)\}, \quad (1)$$

где F — оператор, действующий на совокупность значений $\Phi_0(\rho)$ некоторого исходного поля (ρ — точка пространства этого поля). В частном случае $\Phi_0(\rho)$ может быть функцией пространственного распределения концентраций μ в коренных породах, F — оператором, отображающим

воздействие гипергенных факторов, $\varphi(r)$ — функцией распределения концентраций в образовавшихся гипергенных породах. Можно представить $\Phi_0(\rho)$ и как функцию распределения концентраций в рудообразующем гидротермальном потоке, F — как оператор, отображающий диффузию вещества μ во вмещающие породы, φ — как функцию распределения концентраций в первичном ореоле и т. п.

Тогда аппроксимирующая функция должна быть записана в виде

$$\varphi^*(r) = F^* \{ \Phi_0^*(\rho) \}, \quad (2)$$

где φ^* , F^* , Φ_0^* — аппроксимирующие выражения соответственно для φ , F , Φ_0 .

В общем случае любое из выражений F^* или Φ_0^* может содержать свободные параметры при неизвестном априори оптимальном их числе. Может быть неизвестно априори и то, какой из известных классов операторов и функций является оптимальным для выбора этих выражений. Более того, различные сочетания F^* и Φ_0^* могут давать одну и ту же функцию $\varphi^*(r)$. Поэтому при необходимости отдельной характеристики выражений F и Φ_0 требуется применение алгоритмов аппроксимации с двумерными критериями, использующими признаки обоих этих выражений.

Вообще говоря, функция Φ_0 может рассматриваться, в свою очередь, как результат действия какого-то оператора на другое исходное поле. Если, например, $\varphi(r)$ — распределение рудообразующего элемента в рыхлых породах, а $\Phi_0(\rho)$ — распределение его в коренных, то при известных условиях можно считать, что функция $\Phi_0(\rho)$ есть результат воздействия эндогенных процессов на источник рудного вещества, т. е. функция Φ_0 расщепляется по физическим причинам. В принципе может быть расщеплен по физическим причинам и оператор F . Аппроксимация функции $\varphi(r)$ с таким расщеплением требует, вообще говоря, соответственного увеличения размерности критериев аппроксимации.

С увеличением размерности критериев аппроксимации растет сложность вычислений, принципиальные же положения при этом не меняются.

Таким образом, мы свели решение обратных задач к алгоритмам аппроксимации, изложенным в § 4 гл. I. Поэтому приведем далее лишь примеры, иллюстрирующие применение многомерного критерия аппроксимации.

Пример 1. По геологическим данным, график на рис. 4 изображает распределение концентраций свинца в остаточном геохимическом ореоле. Судя по форме изоконцентрат в плане, по которому построен график, этот ореол связан с рудным телом, сильно вытянутым по простиранию. График построен по профилю, пересекающему примерно под прямым углом длинную ось ореола в ее средней части, где изоконцентраты представляют собой приблизительно прямые линии, перпендикулярные этому профилю. В таком случае распределение концентраций по указанному профилю примерно соответствует полю одномерной диффузии, выражаясь формулой (1, § 3, гл. IV) с поправкой по формуле (1, § 5, гл. IV), т. е.

$$C(x) = \frac{k_d}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_D} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} C_0(\xi) \cdot \exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{2\sigma_D^2}\right) \cdot d\xi, \quad (3)$$

где $C_0(\xi)$ — концентрации в исходном поле — в коренных породах (до разрушения и диффузионного рассеяния рудного материала); $\sigma_D = \sqrt{2Dt}$ — параметр диффузионного рассеяния этого материала; D — коэффициент его диффузии; t — время формирования ореола; $C(x)$ — концентрация в пробе, обозначавшаяся в формуле (1, § 5, гл. IV) через C_d .

Согласно исследованиям, описанным в работах (Соловов, 1959, Дубов, Фурсов, 1966; и др.), обычно величина k_d для свинца в подобных условиях приближенно равна единице. Переходя от формулы (3) к аппроксимирующему выражению, для решения обратной задачи можем записать:

$$C^*(x) = \frac{k_d}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_D^*} \int_{-\infty}^{+\infty} C_0^*(\xi) \cdot \exp\left(-\frac{(x-\xi)^2}{2(\sigma_D^*)^2}\right) \cdot d\xi, \quad (4)$$

где $C^*(x)$ — функция, аппроксимирующая распределение концентраций в ореоле; σ_D^* — искомая оценка параметра оператора диффузионного рассеяния (форма этого оператора принята известной соответственно выражению (3)); $C_0^*(\xi)$ — искомая оценка распределения концентраций в коренных породах.

В данном случае ошибки распределены приближенно логнормально и известна величина $|\Delta|_\varphi = |\Delta \lg C|$ — средняя абсолютная погрешность логарифмов концентраций. Поэтому, согласно § 4 гл. I, естественно использовать разновидность критерия аппроксимации второго рода в виде

$$Z'_{ml} = |\Delta|_{ml}^* - |\Delta|_\varphi.$$

Напомним, что здесь $|\Delta|_{ml}^*$ — среднее абсолютное отклонение логарифмов значений концентраций, полученных при вещественном анализе проб, от логарифмов значений аппроксимирующей функции $C^*(x)$ в тех же точках. При этом индекс l соответствует определенному числу свободных параметров в аппроксимирующей функции, а индекс m означает, что значения этих параметров подобраны так, чтобы значение $|\Delta|_{ml}^*$ было минимальным. Минимизация значения $|\Delta|_{ml}^*$ производится автоматически при вычислении функции $\lg C^*(x)$ методом наименьших квадратов. Поскольку оператор, отображающий диффузию, имеет в рассматриваемом случае заведомо только один параметр σ_D , то варьирование числа параметров в функции $C^*(x)$, а следовательно, и в $\lg C^*(x)$ может производиться только за счет $C_0^*(\xi)$.

Для простоты вычислений в рассматриваемом примере выбрана функция $C_0^*(\xi)$ в виде простого многочлена (учитывая данные предшествующих экспериментов и относительно невысокие требования к точности результатов). Поскольку вид функции определен и неизвестными являются только число и значения параметров, то решение производится на основе алгоритма аппроксимации второго ранга.

Однако переходу через нуль критерия Z'_{ml} соответствует определенная совокупность параметров в функции $C_0^*(\xi)$ только при фиксированном значении σ_D^* : для различных значений σ_D^* можно подобрать различные совокупности этих параметров, удовлетворяющие алгоритму аппроксимации второго ранга по критерию Z'_{ml} . Поэтому требуется введение дополнительных сведений, позволяющих фиксировать значение σ_D^* .

Чем больше σ_D^* , тем больше размах значений вычисляемой функции $C_0^*(\xi)$ в области ее определения. Поэтому почти во всех точках пространства V с увеличением σ_D^* увеличиваются или уменьшаются соответствующие значения $C_0^*(\xi)$. Пусть $C_0(\xi')$ — известное фоновое значение функции $C_0(\xi)$ в какой-либо точке ξ' , причем в связи с образованием ореола величина концентрации, наблюдаемой здесь по данным опробования, существенно выше $k_d \cdot C_0(\xi')$. Тогда вычисляемая при аппроксимации величина $k_d \cdot C_0^*(\xi')$ при малых σ_D^* приближенно равна наблюдаемой концентрации в точке $x = \xi'$ ореола (если пренебречь ошибками), а с увеличением σ_D^* уменьшается, приближаясь к значению

$k_d C_0(\xi')$ и переходя через него. То значение σ_D^* , при котором значение $C_0^*(\xi')$ оказывается наиболее близким к $C_0(\xi')$, и та функция $C_0^*(\xi)$, которая удовлетворяет критерию Z_{ml} при этом значении σ_D^* , являются, согласно основному положению аппроксимации, оптимальными, давая нужное решение.

Нетрудно видеть, что сказанное означает использование двумерного критерия $(C_0^*(\xi') - C_0(\xi'), |\bar{\Delta}|^* - |\bar{\Delta}|)$: мы добивались близости его к нулю приближением к нулю каждой из его составляющих.

Описанное вычисление значений параметров функции вида (4) через $\lg C^*(x)$ с непосредственным использованием метода наименьших квадратов в его обычном виде является сложной задачей. Вычисления упрощаются следующим образом.

В начале методом наименьших квадратов находится оптимальная аппроксимирующая функция $\lg C^*(x)$ из совокупности классов, достаточно простых для вычислений, аналогично примеру в § 4 гл. I (см рис. 4 и табл. 1). Пусть L — число параметров в этой функции. Пользуясь известным представлением интеграла в виде конечной суммы, интегральное уравнение (4) приближенно заменим системой из L алгебраических уравнений:

$$C^*(x_i) = \frac{k_d h}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_D^*} \sum_{j=1}^L C_0^*(\xi_j) \cdot \exp\left(-\frac{(x_i - \xi_j)^2}{2(\sigma_D^*)^2}\right), \quad i = 1, 2, \dots, L, \quad (5)$$

где h — длина отрезков оси Ox , на которые разбивается область численного интегрирования, x_i — центры этих отрезков (область численного интегрирования ограничивается той частью оси Ox , где значения $C^*(x_i)$ существенно отличны от нуля).

Вычисляя по найденной функции $C^*(x)$ значения $C^*(x_i)$ и подставляя их в систему (5) (при очередном испытываемом значении σ_D^*), найдем L значений $C_0^*(\xi_j)$. Заметим, что мы не можем найти большего числа значений $C_0^*(\xi_j)$, так как это потребовало бы соответственно большего числа уравнений в системе (5), а следовательно, и значений $C^*(x_i)$. Но L значений $C^*(x_i)$ (точнее, точек $(x_i, C^*(x_i))$) полностью определяют выбранную функцию $C^*(x)$, имеющую L параметров. Иными словами, найденная функция $C^*(x)$ несет информацию, определяющую положение только L взаимно независимых названных точек. Следовательно, составление системы вида (5) из большего числа уравнений означало бы поиск совокупности значений $C_0^*(\xi_j)$, не обеспеченной имеющейся информацией. Это выражается в недостаточной обусловленности и неустойчивости решения. В иллюстрируемом примере $L=4$.

В качестве значения $C_0(\xi')$ примем фоновую концентрацию свинца, которая в рассматриваемом случае приближенно равна нулю. Следовательно, величину σ_D^* , подставляемую в уравнения (5), мы можем увеличивать только до тех пор, пока не появятся отрицательные значения $C_0^*(\xi)$.

В качестве области интегрирования возьмем интервал $(0; 3,43)$; примем $h=3,43/4=0,86$; $x_1=\xi_1=0,43$; $x_2=\xi_2=1,29$; $x_3=\xi_3=2,15$; $x_4=\xi_4=3,0$. Величины $C^*(x_i)$ берутся как антилогарифмы значений $y_3(x_i)$, указанных в табл. 1: $C^*(x_1)=134,0$; $C^*(x_2)=618,0$; $C^*(x_3)=814,7$; $C^*(x_4)=133,7$. Подставляя эти величины в уравнения (5) при разных σ_D^* , находим, что все получаемые значения $C_0^*(\xi)$ положительны при $\sigma_D^* \leq 0,43$. Дальнейшее же увеличение σ_D^* на 0,1 уже приводит к появлению в решении отрицательных значений $C_0^*(\xi)$ (для $\xi \in (0; 3,43)$). Поэтому указанная величина $\sigma_D^*=0,43$ принята как приближенно равная

параметру σ_b ; при этом получены значения

$$C_0^*(\xi_1) = 81,5; \quad C_0^*(\xi_2) = 637,0; \quad C_0^*(\xi_3) = 928,5; \quad C_0^*(\xi_4) = 41,8.$$

Согласно результатам опробования ряда месторождений, распределение свинца в коренных породах может быть приближенно описано изменением логарифмов концентраций по параболе (кривая $\lg C$ всюду оказывалась ближе к параболе, чем кривая C). Можно показать, что это согласуется и с некоторыми решениями прямой задачи. Поэтому для первого приближения полагаем, что функция $\lg C_0^*(\xi)$ является параболой третьего порядка (Y_3), принимающей в точках ξ_i указанные значения $\lg C_0^*(\xi_i)$. Составляя соответствующие четыре уравнения, находим коэффициенты этой параболы $\lg C_0^*(\xi) = Y_3 = 1,440 + 2,226 \cdot \xi + 2,790 \cdot \xi^2 - 0,207 \cdot \xi^3$. Беря антилогарифм от Y_3 , получаем искомую кривую $C_0^*(\xi)$ (рис. 55).

В данном примере значения $C_0^*(\xi)$ сравнительно мало отличаются от наблюдаемых концентраций в ореоле. На практике же встречаются гораздо более сложные ситуации, когда применение описанного математического аппарата приводит к значительным уточнениям представлений об оруденении. Это видно в следующем примере.

Пример 2. На рис. 56 штриховыми линиями околочены максимумы аномалий цинка в элювии — делювии по правилам, соответствующим действующей инструкции. Сплошными линиями показаны изоконцентраты цинка, вычисленные для коренных пород с помощью описанного нами математического аппарата.

Здесь ореолы являются остаточными, как и в предыдущем примере, но вычисления проведены с учетом диффузионного рассеяния μ по площади. В общем виде распределение концентраций определяется здесь формулой (2, § 3, гл. IV). Согласно свойству композиции процессов переноса (см. § 1, гл. IV), оператор, выражаемый этой формулой, можно представить также композицией операторов, один из которых выражается формулой (1, § 3, гл. IV) и применяется для отображения диффузии по линиям, параллельным оси Ox . Другой оператор получается из этой же формулы подстановкой в нее y вместо x , η вместо ξ и применяется для отображения диффузии по линиям, параллельным оси Oy ,

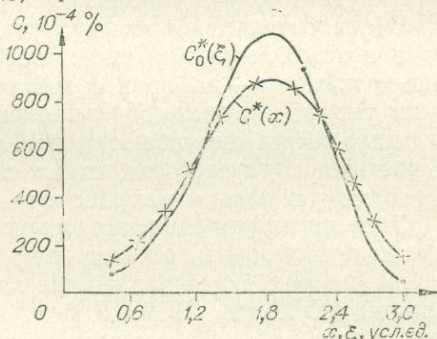


Рис. 55. Кривые $C^*(x)$ и $C_0^*(\xi)$ для фактических данных, представленных на рис. 4.

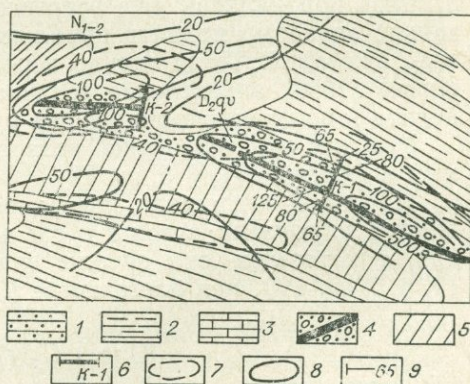


Рис. 56. Распределение концентраций цинка в рыхлых и коренных породах. Участок Доумен Южный (металлометрическая съемка масштаба 1 : 10 000 Центральной геохимической экспедиции Казгеофизтреста). Составил М. С. Тонкопий.

1 — мелкозернистые песчаники; 2 — алевролиты, алевропесчаники; 3 — известняки; 4 — зона минерализации в гравелитах; 5 — окварцевание; 6 — канава; 7 — изолинии концентраций цинка (в $10^{-4}\%$) по данным опробования верхнего горизонта рыхлых пород; 8 — изолинии концентраций цинка в коренных породах, вычисленные по данным опробования верхнего горизонта рыхлых пород; 9 — концентрации цинка в коренных породах по данным опробования этих пород в канаве.

причем в качестве начального распределения вещества μ здесь принимается то, которое образуется в результате действия предшествующего оператора. Нетрудно видеть, что это означает использование программы вычислений, описанной в предыдущем примере, по системам взаимно перпендикулярных линий. Это и было сделано в рассматриваемом случае. Величина k_d здесь также была принята равной 1.

В результате вычислений получено поле концентраций, существенно отличающееся от наблюдаемого: фиксируется заметный сдвиг максимума концентраций, существенный для горных работ, и большое изменение концентраций. Если при анализе проб максимальные концентрации цинка выражались только десятками единиц $10^{-4}\%$, то вычисления показали наличие в коренных породах концентраций в сотни таких единиц. Опробование достаточно длинной канавы № 1 показало, что данные расчетов соответствуют истинному положению: результаты опробования коренных пород (см. рис. 56) отличаются от расчетных только в пределах обычных погрешностей вещественного анализа и флуктуаций концентраций.

В относительно простых случаях, когда число свободных параметров в искомой функции мало, обратная задача может решаться с помощью палеток — наборов теоретических кривых, выбираемых на основании тех же алгоритмов аппроксимации. Бывает также, что неизвестные параметры оцениваются несложным прямым расчетом. Несмотря на частный характер, ряд таких случаев играет в геохимических поисках заметную роль, и мы рассмотрим их в § 2.

Учет перераспределения вещества по фракциям в рыхлом покрове. Можно использовать оценки коэффициента k_d , пользуясь данными, полученными ранее для различных химических элементов и геологических условий (Соловов, 1959; Дубов, Фурсов, 1966; Дубов, 1971; и др.). Однако для многих элементов и условий может еще потребоваться его уточнение или вычисление заново. Эта задача также является обратной и имеет некоторую специфику.

Простейшая оценка величины k_d вычисляется для остаточных ореолов при наличии уже вскрытых месторождений, если эту величину можно заведомо принять приближенно постоянной в пределах изучаемых аномалий. Тогда можно использовать первое, данное А. П. Солововым (1959) определение величины k_d как отношения продуктивности ореола к продуктивности выхода рудного тела.

Уточним это положение, возвращаясь к обозначениям, использованным в формуле (1, § 5, гл. IV).

Пусть S — площадь поверхности опробования, на которой проявляются изучаемые ореолы и где находятся объекты в коренных породах, с которыми эти ореолы связаны. Тогда, интегрируя равенство (1, § 5, гл. IV), при постоянстве k_d на всей площади S получаем сразу:

$$k_d = \int_S C_d(r) dS / \int_S C(r) dS, \quad (6)$$

где r — точка элемента dS площади, где отбирается проба. Но в формуле (1, § 5, гл. IV) величина $C(r)$ есть концентрация в точке r , которая наблюдалась бы при отсутствии ошибок, избирательного выноса или привноса вещества в остаточный ореол, а также без неравномерностей распределения концентраций по фракциям. Следовательно, интеграл в знаменателе выражения (6) отражает количество вещества, бывшее в коренных породах, из которых образовались опробуемые рыхлые породы. Поэтому, несмотря на различие самих значений $C(r)$ и $C_0(\rho)$ (связанное с процессами переноса), $\int_S C(r) dS = \int_S C_0(\rho) dS$, т. е.

$$k_d = \int_S C_d(r) dS / \int_S C_0(\rho) dS. \quad (7)$$

Это выражение и есть отношение названных продуктивностей, если величины $C_0(\rho)$ относятся только к рудным телам, а $C_d(r)$ выражают только концентрации в ореолах этих тел.

Однако бывает трудно определить, какая часть наблюдаемой концентрации обусловлена рудным телом, а какая является нерудной составляющей. Кроме того, нередко возникает необходимость оценки результатов геохимической съемки в новых условиях, при отсутствии вскрытых месторождений. В таком случае бывает возможно воспользоваться следующей закономерностью. Предположим, что S есть такая достаточно большая часть территории исследований, что количество μ в рыхлых образованиях здесь с достаточной относительной точностью можно считать обусловленным разрушением коренных пород, залегающих на этой же площади (на этой площади может быть много ореолов). Тогда, в случае постоянства k_d на всей площади S , равенство (7) остается справедливым, если понимать под C_0 и C_d концентрации соответственно в коренных породах и опробуемой фракции рыхлых образований, независимо от принадлежности ореолов к определенным рудным телам или другим объектам.

Поделим числитель и знаменатель правой части равенства (7) на S . Тогда получим:

$$k_d = \bar{C}_d / \bar{C}_0, \quad (8)$$

где \bar{C}_0 и \bar{C}_d — средние значения соответственно величин $C_0(\rho)$ и $C_d(r)$ на площади S . Эти средние могут быть оценены очевидным образом по результатам опробования с использованием положений, описанных в § 3 гл. III, причем теперь для оценки k_d можно использовать любые, естественные и искусственные, обнажения коренных пород, вскрывшие и не вскрывшие рудные тела.

Благодаря такой возможности автору и участвовавшим в экспериментах другим исследователям удалось сравнительно легко изучить изменение коэффициента k_d в различных условиях, показать его зависимость от элемента μ и геологической обстановки (Дубов, 1971₁; Дубов, Фурсов, 1966; Найгебауэр, 1966).

Возможны случаи, когда коэффициент k_d нельзя принять постоянным даже на относительно малой части S исследуемой территории. Тогда, очевидно, требуется применение алгоритмов аппроксимации для вычисления оценок функции $k_d = k_d(r)$. На этом довольно сложном вопросе, пока еще не разработанном в деталях, а также на аналогичных вопросах, касающихся вторичных ореолов других типов и потоков рассеяния, мы здесь останавливаться не будем.

Выбор изучаемой характеристики геохимического поля. При решении обратных задач не всегда целесообразно использовать непосредственно поле концентраций. Часто можно наблюдать существенное изменение концентраций в поперечных сечениях потоков вещества, предполагаемых одномерными. В таких случаях отбор проб и непосредственная интерпретация наблюдаемых изменений концентраций только вдоль линий, обычно располагаемых примерно по оси потока, могут приводить к серьезным ошибкам из-за фактически различного распределения вещества потока в разных сечениях. Поэтому в таких случаях бывает целесообразно опробовать поперечные сечения потоков и вместо отдельных концентраций исследовать изменение интегралов концентраций (продуктивностей $Q(x)$) по этим сечениям. Если границы потока резкие и сечения имеют постоянную площадь $S(x)$, то отсюда можно найти средние концентрации $\bar{C}(x) = Q(x)/S(x)$, которые и используют-

ся вместо $C(x)$ для решений. В противном случае используются сами величины $Q(x)$, поскольку они пропорциональны тем концентрациям, для которых выведены формулы.

Оценка геохимической подвижности элементов, размеров аномалий и времени их образования

Теория геохимических методов поисков строится на представлениях о геохимической подвижности элементов. В настоящее время наиболее распространены два способа оценки этой подвижности.

Первый способ применяется при изучении распределения элементов, участвующих в одном процессе, когда наблюдается несовпадение максимумов их концентраций. Более подвижными считаются те элементы, максимумы которых отстоят дальше от предполагаемых источников. Так, в восходящих гидротермальных потоках более подвижны элементы, максимумы концентраций которых находятся ближе к поверхности земли.

Справедливость такого определения представляется интуитивно очевидной при прочих равных условиях. Но, строго говоря, положение максимума концентрации еще не определяет расстояния, на которое переносится элемент. Это становится очевидным при рассмотрении кривых концентраций различных элементов с совпадающими максимумами. Такое положение наблюдается часто при монотонном падении концентраций с удалением от источников или других точек, например максимумов остаточных ореолов.

Для таких случаев предназначен второй распространенный способ оценки подвижности: если отношение концентрации одного из элементов к концентрации другого растет с удалением от источника, то подвижность первого элемента считается больше подвижности второго. Однако при сложной форме аномалий отношения концентраций могут по-разному меняться в разных их частях. Это очевидно для случая, когда не совпадают максимумы концентраций сравниваемых элементов. Тогда описанные способы оценки подвижности могут давать противоречивые результаты.

Все перечисленные недостатки обусловлены одним, общим для данных способов: оба способа основаны на различных частных признаках, связанных с геохимической подвижностью не однозначно. Чтобы устранить или хотя бы уменьшить такой недостаток, необходимо прежде всего уточнить само понятие геохимической подвижности, ранее в литературе строго не определявшееся.

Соответственно сложившимся представлениям и аналогиям целесообразно понимать под геохимической подвижностью какого-либо вещества μ в рассматриваемом процессе среднюю скорость, приобретаемую частицами этого вещества, в расчете на единицу напряженности физического поля, вызывающего движение этих частиц.

При таком определении могут быть вычислены и сопоставлены оценки подвижности различных веществ в различных процессах, если имеются сведения о напряженности полей (или, что то же самое, о действующих силах), продолжительности процессов и расстояниях, пройденных частицами изучаемых веществ. Эта задача может быть довольно сложной, тем более, что к настоящему времени еще не развита в нужной для этого мере теория действующих сил геохимических процессов.

Для относительного же сопоставления геохимических подвижностей веществ, участвующих в одном процессе, достаточно иметь сведения о средних расстояниях \bar{R} , пройденных частицами. В работах (Дубов, 1963_{1,2,3,5}; 1966₂) было обращено внимание на возможность вычисления оценок этих расстояний и даны начальные положения соответствующей

теории. Эта теория позволяет единообразно и несложно оценивать величины \bar{R} во всех случаях, в которых применялись описанные выше менее строгие прежние способы оценки подвижности. Она применима и в случаях, в которых ранее оценка подвижности представлялась невозможной: когда наблюдаемая концентрация в одной и той же точке наблюдения обусловлена поступлением вещества μ из разных точек исходного поля (разных источников) и с разных направлений.

Основные положения теории сводятся к следующему.

Вначале предположим, что все вещество μ , создающее концентрацию $C(r)$ в точке r пространства \mathcal{V} изучаемого поля, поступило из одной точки ρ пространства V исходного поля. Тогда в объеме dV , включающем точку r , находится количество вещества μ , равное $C(r) \cdot dV$. Каждая единица этого количества переместилась на расстояние $|r-\rho|$ от исходного положения частиц μ , что в сумме для всех таких единиц составляет расстояние $|r-\rho| \cdot C(r) \cdot dV$. Проинтегрировав это выражение по \mathcal{V} и поделив на общее число Q этих единиц, получим среднее смещение частиц вещества μ изучаемым процессом*:

$$\bar{R} = \frac{1}{Q} \int_{\mathcal{V}} |r-\rho| \cdot C(r) \cdot dV. \quad (9)$$

Здесь Q — общее количество вещества μ в пространстве \mathcal{V} , следовательно:

$$Q = \int_V C(r) \cdot dV. \quad (10)$$

Эти выражения позволяют оценивать величины \bar{R} по наблюдаемым значениям концентраций практически во всех случаях, где раньше применялись описанные выше нестрогие способы оценки подвижности. В частности, при одномерном потоке вещества от стенки рудоподводящего канала в качестве $|r-\rho|$ в формулу (9) следует подставить расстояние от точки r с концентрацией $C(r)$ до этой стенки.

При поступлении вещества μ не из одной точки, а из некоторой области, находящейся в одном направлении от всех точек r изучаемого пространства, можно получить по формулам (9) и (10) сравнительные оценки для величин \bar{R} , принимая в качестве ρ любую из точек пространства, находящуюся на указанном направлении. В частности, при исследовании одномерных восходящих гидротермальных рудообразующих потоков в случаях, когда наблюдаются лишь положительные аномалии изучаемых веществ, вместо ρ можно подставить любую точку, находящуюся ниже всех этих аномалий. При этом мы, не получая оценок истинных значений \bar{R} , сможем сказать, для какого из элементов такое значение больше.

Для повышения точности оценок в формулы (9) и (10) желательно подставлять, разумеется, не непосредственно наблюдаемые значения концентраций, а соответствующие аппроксимирующие функции.

Если в качестве аппроксимирующей функции подставить сюда теоретическое выражение, представляющее собой физико-математическую модель изучаемого процесса, то получим зависимость величины \bar{R} от определенных характеристик процесса (примеры таких зависимостей будут рассмотрены в следующем параграфе). Подстановка таких выражений дает возможность оценки величины \bar{R} в упоминавшихся слу-

* Это смещение равно среднему расстоянию между исходными и конечными положениями частиц, измеренному по прямой. Оно связано со средним расстоянием — путем, пройденным частицами, но не всегда равно ему, так как действительные пути частиц между названными положениями могли быть не прямыми. В частности, это очевидно для диффузии, где частицы участвуют в броуновском движении и могут проходить весьма сложные пути.

чаях поступления вещества μ из разных точек ρ и с разных направлений. Покажем это.

Пусть вещество μ распределено произвольно в пространстве V исходного поля. Предположим, что нам известна зависимость $C(r)$ от этого распределения. Тогда может быть найдена функция $\frac{\partial C(r)}{\partial V}$ — составляющая концентрации $C(r)$, связанная с поступлением μ из единицы объема dV , включающего точку ρ . Частицы вещества μ , входящего в эту составляющую, переместились на расстояние $|r-\rho|$ от своего первоначального положения. Поэтому, интегрируя по \mathcal{V} и V произведение $\frac{\partial C(r)}{\partial V} |r-\rho|$ и деля полученное выражение на общее количество Q вещества μ , поступившего из V в \mathcal{V} , получим среднее расстояние, на которое переместились частицы μ в изучаемом процессе:

$$\bar{R} = \frac{1}{Q} \int_{\mathcal{V}} \int_V |r-\rho| \cdot \frac{\partial C(r)}{\partial V} \cdot dV \cdot d\mathcal{V}. \quad (11)$$

Теперь очевидно, что, зная функцию $C^*(r)$ (полученную при решении обратной задачи), мы можем вычислить оценки величин Q и \bar{R} , подставляя эту функцию в формулы (10) и (11) вместо $C(r)$.

Иногда по теоретическим соображениям или условиям наблюдений представляют интерес величины \bar{R}_l и \bar{R}_s — средние значения проекций смещения частиц μ соответственно на определенную линию или плоскость. Очевидно, что их также можно понимать как величины \bar{R} при соответствующем определении пространства \mathcal{V} .

При диффузии в любом однородном (по D) трехмерном пространстве каждая частица равновероятно участвует в смещениях во всех возможных направлениях. В таких случаях существует всегда определенное соотношение между величинами \bar{R}_l , \bar{R}_s для любой выбранной линии или плоскости и величиной среднего полного смещения, которую мы обозначим $\bar{R}_{\mathcal{V}}$ (в отличие от символа \bar{R} , который может употребляться как общий во всех этих случаях). В работе (Дубов, 1966₂) показано, что это соотношение есть

$$\bar{R}_{\mathcal{V}} = \frac{4}{\pi} \bar{R}_s = 2\bar{R}_l. \quad (11a)$$

Иногда можно предполагать однородность пространства \mathcal{V} только по двум координатным осям. Тогда вместо равенства (11a) остается выражение

$$\bar{R}_s = \frac{\pi}{2} \bar{R}_l. \quad (11b)$$

В § 2 будут детально рассмотрены вычисления по этим общим формулам с разбором конкретных примеров.

Размеры геохимических аномалий, в обычном понимании как расстояния между определенными точками границ, как правило, не имеют существенного смысла, так как за время формирования аномалии какие-то составляющие ее частицы, имеющие скорости значительно выше средних, удаляются на неопределенно большие расстояния. Поэтому при выводе формул, описывающих диффузию, получают выражения, не указывающие пределов ее проявления. Строго говоря, диффундирующие частицы не могут удаляться на расстояния больше того, которое проходит свет за то же время в пустоте, но при прикладных исследованиях в земных условиях эти расстояния можно считать бесконечными. Поэтому, в частности, и формула (1, § 3, гл. IV) дает отличные от нуля значения $C(x)$ при сколько угодно больших значениях x , если имеется не нулевой интервал точек ξ с $C_0(\xi) \neq 0$.

Такая закономерность проявляется в том, что концентрации в наблюдаемом поле на периферии аномалии не падают до нуля в каких-либо определенных точках, а приближаются к нулю лишь асимптотически. Вполне очевидно, что практический интерес представляют лишь части аномалий, где концентрации не слишком малы.

В настоящее время часть исследователей пользуется еще понятием размера аномалии как размера той ее части, где обнаруживаются аномальные концентрации при существующих методах наблюдений. Согласно изложенному выше, такие размеры с увеличением чувствительности измерений могут возрастать для одной и той же аномалии во сколько угодно раз. Для теоретических же исследований и практических прогнозов, в частности при оценке целесообразности перехода на более чувствительные методы анализа вещества, необходима объективная характеристика линейных размеров аномалий. В качестве такой характеристики может быть использована величина \bar{R} или другая, однозначно связанная с какими-либо средними характеристиками перемещений частиц. Далее мы будем использовать, например, среднее квадратическое удаление частиц от их исходных положений.

Время (или продолжительность) процесса может быть определено из любой формулы, куда входят t , при наличии определенных сведений о других параметрах. В частности, мы описывали способ вычисления оценки величины $\sigma_D = \sqrt{2Dt}$. Если, кроме того, известна оценка коэффициента диффузии D , то, согласно этому выражению, найдем оценку для t : $t^* = \sigma^2 / (2D^*)$.

Время пребывания различных частиц в изучаемом процессе может быть различным. В частности, при диффузии вещества μ от некоторой границы, на которой поддерживается концентрация C_0 , лишь малая часть частиц поступает в изучаемое пространство в начале процесса и участвует в нем все или почти все время t . Соответственно этому расстояния, проходимые различными частицами в процессе, различны даже при одинаковой подвижности частиц. Это затрудняет получение численной оценки подвижности, хотя в некоторых случаях учет такого явления возможен (см. § 2, гл. V и работу (Дубов, 1971)).

§ 2. УПРОЩЕНИЕ ИНТЕРПРЕТАЦИИ

В ряде случаев представляют интерес упрощенные решения, пригодные в относительно простых (но довольно распространенных) случаях, когда для интерпретации удается выделить ореолы определенных известных типов. Решения особенно упрощаются, когда эти ореолы связаны с одиночными однородными объектами, имеющими резкие границы.

Для выделения ореолов одиночных объектов приходится исключать фон для каждой из аномалий в отдельности. Если, например, интерпретируется остаточный ореол рудного тела, залегающего в минерализованной относительно широкой зоне тектонического дробления, то перед его интерпретацией упрощенными приемами требуется исключить фон, обусловленный ореолом этой зоны (в то время как описанные выше положения позволяли получить сразу функцию — оценку распределения концентраций в коренных породах, включая и рудное тело, и вмещающую его зону).

При названных ограничениях оказывается возможным получить формулы для решения обратных задач без технических приспособлений или с простейшим приспособлением в виде атласа теоретических кривых (палеток). Для интерпретации удобно разделять аномалии по таким признакам, которые легко опознаются до ее проведения и указывают на требующиеся для нее приемы.

Ореолы, описываемые оператором с экспоненциальной функцией

К ореолам этого типа мы относим такие геохимические аномалии, в которых кривая, аппроксимирующая изменение концентраций с удалением от максимума, представляет собой экспоненту. В случае одномерного процесса (изменения концентраций только по оси Ox) она имеет вид:

$$C(x) = C_0 \cdot \exp(-A \cdot x), \quad (1)$$

где C_0 — концентрация в произвольной точке; x — расстояние от этой точки.

Эти ореолы опознаются особенно легко по их графикам концентраций, вычерченным в полулогарифмическом масштабе: при правильном исключении локального фона такие графики представляют собой прямые.

Как было показано решениями прямых задач (гл. IV), ореолы типа (1) могут образовываться в определенных условиях как фильтрационными, так и диффузионными процессами, соответственно чему $A = \lambda$ или $A = \sqrt{\kappa/D}$, при заведомо достаточно больших UT или κT и направлении оси Ox по потоку. Решение вопроса о том, является ореол диффузионным или фильтрационным, в таких случаях приходится основывать на дополнительных данных. В частности, фильтрационный поток может проявлять себя образованием вытянутого ореола, в то время как диффузия в однородной среде создает изометрические аномалии вокруг источника μ .

Согласно формуле (1), для любых удовлетворяющих ей двух точек x_1 и x_2 имеем: $C(x_1) = C_0 \cdot e^{-Ax_1}$, $C(x_2) = C_0 \cdot e^{-Ax_2}$, $\lg C(x_2) - \lg C(x_1) = -\lg e \cdot (x_2 - x_1) \cdot A$. Отсюда

$$A = -\frac{1}{\lg e} \cdot \frac{\Delta \lg e}{\Delta x} \approx -2,3026 \cdot \frac{\Delta \lg C}{\Delta x}, \quad (2)$$

где $\Delta \lg C = \lg C(x_2) - \lg C(x_1)$, $\Delta x = x_2 - x_1$. Отношение $\Delta \lg C / \Delta x$ есть тангенс угла наклона α прямой (2) к оси абсцисс при единичных модулях масштаба. Если же единица масштаба по оси абсцисс составляет L единиц измерения (например, сантиметров), принятых при вычерчивании графика, т. е. $1:L$ — числовой масштаб изображения, а модуль логарифмического масштаба составляет M таких единиц, то, согласно (2), можно написать:

$$A = -\frac{\operatorname{tg} \alpha}{\operatorname{tg} e \cdot M \cdot L} = -2,3026 \frac{\operatorname{tg} \alpha}{M \cdot L}. \quad (3)$$

Зная A и C_0 , нетрудно найти линейную продуктивность ореола (по оси Ox) правее точки, принятой за начало оси Ox : согласно формулам (1) и (10, § 1), принимая ось Ox за пространство \mathcal{V} ,

$$Q_l = \int_0^{\infty} C(x) \cdot dx = C_0 \int_0^{\infty} \exp(-A \cdot x) \cdot dx = \frac{C_0}{A}. \quad (4)$$

Зная A , можно оценить также среднее смещение частиц μ вдоль оси Ox : согласно формулам (1) и (9, § 1), оно равно

$$\bar{R}_l = \frac{1}{Q_l} \int_0^{\infty} x \cdot C_0 \cdot \exp(-Ax) \cdot dx = \frac{1}{A}. \quad (5)$$

Как видим, для оценки такого смещения достаточно знать лишь $\Delta \lg C$ на любом отрезке Δx экспоненты, знание же истинного положения границы ореола при этом не обязательно.

Около столбообразных рудных тел и узких рудоподводящих каналов иногда фиксируется примерно экспоненциальное падение концентраций по радиусам, идущим от этих каналов перпендикулярно им. Аппроксимируем поперечное сечение столбообразного тела кругом с радиусом R_0 и концентрацией C_0 на границе тела, т. е. на расстоянии R от центра сечения. Введем полярные координаты: радиус-вектор R и полярный угол ψ . Начало координат поместим в упомянутый центр.

Тогда распределение концентраций выражается формулой $C(R, \psi) = C_0 \cdot \exp(-B \cdot R)$, где B — некоторый параметр, вычисляемый аналогично параметру A ; пространством V является поверхность (плоскость) S , перпендикулярная оси тела; элемент пространства (поверхности) $dS = R \cdot d\psi \cdot dR$. Согласно формуле (10, § 1), получаем площадную продуктивность аномалии:

$$Q_s = \int_s C(R, \psi) \cdot dS = C_0 \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \exp(-BR) \cdot R d\psi \cdot dR = \\ = \frac{2\pi \cdot C_0}{B} \cdot \left[R_0 \cdot \exp(-B \cdot R_0) + \frac{1}{B} \cdot \exp(-B \cdot R_0) \right]. \quad (6)$$

Если $R_0=0$; то

$$Q_s = \frac{2\pi C_0}{B^2}. \quad (7)$$

Тогда (при $R_0=0$) среднее смещение от центра ореола составляет, по определению, $\bar{R}_s = \frac{1}{Q_s} \int_s R \cdot C(R, \psi) \cdot dS$, где S — вся площадь, занимаемая ореолом. Подставляя сюда приведенные выше выражения, получаем:

$$\bar{R}_s = \frac{1}{Q_s} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} R \cdot C(R, \psi) \cdot R \cdot d\psi \cdot dR = \frac{B^2}{2\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} R^2 \cdot \exp(-B \cdot R) d\psi \cdot dR = 2/B. \quad (8)$$

Согласно формуле (11б, § 1), при диффузии в однородном по D трехмерном пространстве имеем: $\bar{R}_s = \frac{\pi}{2} \bar{R}_i$. Следовательно, в таком случае, по формулам (5) и (8), $\frac{2}{B} = \frac{\pi}{2} \cdot \frac{1}{A}$, т. е. $B = \frac{4}{\pi} \cdot A$. Поскольку при диффузии $A = \sqrt{\kappa/D}$, то отсюда получаем $B = \frac{4}{\pi} \sqrt{\kappa/D}$. Таким образом раскрывается физический смысл и величины B . Аналогично можно получить распределение вещества в трехмерных процессах и при других формах исходных полей.

Диффузионное перемешивание частиц рыхлых образований приводит к характерному изменению формы кривой наблюдаемых концентраций, зависящему от параметра $\sigma_D = \sqrt{2DT}$ (см. § 3, гл. IV). Если пространственное распределение концентраций в коренных породах экспоненциально, то диффузионное перемешивание рыхлых образований вызывает отклонение от него тем больше, чем больше σ_D . Поэтому приближенная экспоненциальность распределения μ на горизонте опробования рыхлых пород означает малую роль делювиального диффузионного рассеяния. Тогда наблюдаемые концентрации C_d отличаются от концентраций C_h в коренных породах только за счет отбора в пробы определенной фракции, т. е. для каждой точки можно принять $C_d = k_d \cdot C_h$ или $C_h = C_d \cdot k_h$. Это и есть решение обратной задачи в данном случае.

Проиллюстрируем интерпретацию ореолов рассматриваемого типа. Пример 1. На рис. 57 показан график концентраций меди в рыхлых породах над железной шляпой (с пленками медной зелени) и вмещающими ее эффузивами. Контакт шляпы с вмещающими породами перпендикулярен профилю наблюдений. При построении графика для интерпретации использовались: $L=5$ м/см, $M=4$ см, $C_0=0,01\%$. Фактический график аппроксимируется ломаной линией, состоящей из двух отрезков — горизонтального и наклонного. Для второго из них $C_0=0,15\%$ (за точку $x=0$ принято место сочленения этого отрезка с горизонтальным), $\text{tg } \alpha = -0,523$, т. е., по формулам (2—5), $A=0,0602$ м⁻¹,

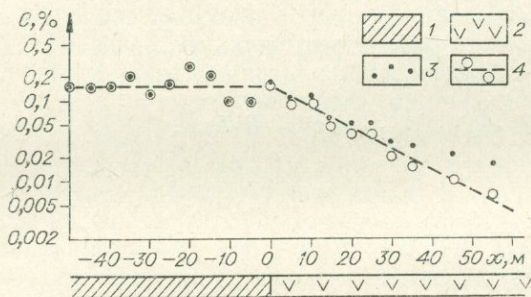


Рис. 57. Концентрации меди в продуктах разрушения железной шляпы и эффузивов (Казахстан, фактические данные А. А. Бербеца).

1 — железная шляпа с пленками медной зелени; 2 — эффузивы; 3 — наблюдаемые концентрации меди в пробах; 4 — вычисленные величины (за вычетом фона) и сглаженный график аномальных значений $C(x)$.

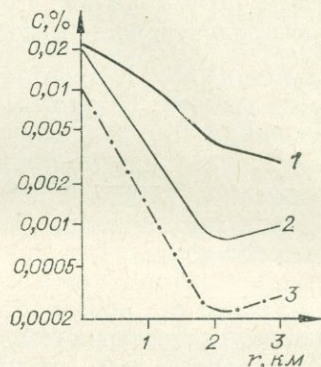


Рис. 58. Концентрации химических элементов в гранитах в районе кварц-вольфрамитового месторождения Дедова гора (Забайкалье, данные автора).

r — расстояние от центра месторождения. Графики усредненных концентраций: 1 — олова, 2 — вольфрама, 3 — висмута.

$Q_l=2,49$ м. %, $\bar{R}_l=16,6$ м. На основании формы графика делается заключение о малом влиянии диффузионного перемешивания рыхлых пород. Следовательно, горизонтальный отрезок отображает концентрации меди в железной шляпе. Действительно, опробование коренных пород по канаве, расположенной поблизости, подтвердило это (как уже упоминалось, для меди $k_d \approx 1$). В данном случае опробование велось по рыхлым породам мощностью не более первых десятков сантиметров. Величина σ_D при прочих равных условиях обычно тем меньше, чем меньше высота горизонта опробования над коренными породами. При найденной значительной величине \bar{R}_l это вполне объясняет причину относительно малого влияния диффузионного перемешивания рыхлого материала.

Контакт железной шляпы с боковыми породами относительно резкий, и имеются основания полагать, что описанный ореол образовался в результате гипергенной миграции меди в окружающее пространство. Довольно большая величина \bar{R}_l в коренных породах свидетельствует о миграции меди в подвижной (жидкой) фазе, находившейся в трещинах и порах пород. В эту фазу переходила медь в связи с растворением рудообразующих минералов после образования рудного тела.

Рис. 57 получен снятием значений C_d с плана, на котором видно, что ореол окружает железную шляпу со всех сторон, без существенно-го увеличения \bar{R}_l в сторону падения склона, имеющего незначительный наклон. В совокупности с соображениями о гипергенном происхождении ореола это делает более вероятным диффузионное образование

ореола: фильтрация в подобных гипергенных условиях происходит с вадозными водами преимущественно в направлении падения склона. Следовательно, здесь, согласно формуле (11а, § 1), $R_v = 2R_l = 33,2$ м.

Пример 2. На рис. 58 показано изменение концентраций нескольких элементов с удалением от одного из месторождений вольфрама в Восточном Забайкалье. Здесь опробовались коренные выходы гранитов по нескольким маршрутам и строились кривые усредненных концентраций для сглаживания локальных флуктуаций по различным радиусам. Форма описываемого ореола в плане примерно изометрична. Правые части приводимых графиков концентраций осложнены из-за приближения некоторых маршрутов к другому месторождению; левые части представляют собой хорошо выраженные экспоненты и интерпретировались с вычислением величины B так же, как это было сделано в предыдущем примере для A . В связи с изометричностью ореола в плане вычислялась величина \bar{R}_s по формуле (8). Она оказалась равной (в км): для олова 2,4; вольфрама 1,2; висмута 1,02. Большие величины \bar{R}_s здесь можно объяснить тем, что ореол месторождения в целом образован за счет фильтрации снизу рудообразующих растворов, расходящейся по мере движения кверху (величина \bar{R}_s здесь измеряется в горизонтальной плоскости). Подставляя указанные выше величины B и взятые с графиков значения C_0 в формулу (7), получим площадную продуктивность для ореолов (в $\text{м}^2 \cdot \%$): олова $198 \cdot 10^3$; вольфрама $46 \cdot 10^3$; висмута $16 \cdot 10^3$. Для наглядности интересно перевести эти числа в тонны металла, для чего умножим полученные значения Q_s на вес 1 м^3 гранитов, равный примерно 2,5 т. Получим количество металла, привнесенного в слой гранитов толщиной 1 м (в тоннах): олова 4950; вольфрама 1150; висмута 40. Примечательно, что во вмещающих породах около некоторых промышленных рудных тел этого месторождения нет локальных положительных ореолов вольфрама заметных размеров. При опробовании с шагом 5 см и более около промышленных кварц-вольфрамитовых жил здесь иногда фиксировалось распределение вольфрама, не отличимое от распределения вдали от них. Месторождение же в целом отмечается переменными, в среднем повышенными концентрациями.

Отрицательные аномалии интерпретируются аналогично положительным по графикам отрицательных аномальных концентраций. Это дает возможность оценивать вынос μ из горных пород и получать интересные генетические выводы. Пример такой интерпретации был разобран в работе (Дубов, Найгебауэр, Соловьева, 1966). Здесь мы на нем не останавливаемся.

Приближенно экспоненциальное распределение концентраций является довольно распространенным и фиксировалось многими авторами. В частности, ореолы с таким распределением показаны в статье (Моррис, Ловеринг, 1954), где авторы предполагали диффузи-

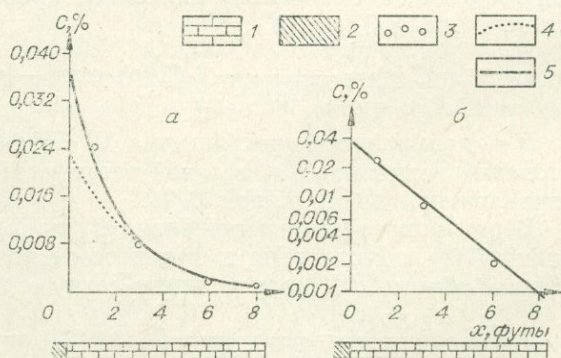


Рис. 59. Ореол цинка около полиметаллической жилы Юрика-Хилл, по данным Х. Т. Морриса (Моррис, Ловеринг, 1954).

a — арифметический масштаб; b — полулогарифмический масштаб. 1 — доломит Аякс; 2 — рудная жила; 3 — концентрация цинка, по данным химического анализа; 4 — теоретическая кривая диффузии, по Х. Т. Моррису; 5 — теоретическая кривая концентраций в твердой фазе диффузионно-сорбионного ореола при $C_{от} = 0,036\%$, $\mu/D = 0,0002 \text{ см}^{-2}$, $\mu T > 10$.

онное происхождение аномалий, но не учли процесса поглощения. Учет этого процесса на основании изложенных положений дает улучшение согласия результатов их наблюдений с теорией (рис. 59).

Линейность графика экспоненциального пространственного распределения концентраций в полулогарифмическом масштабе позволяет легко проводить экстраполяцию простым продолжением графика в случаях, когда в подземной горной выработке появляется периферическая часть такого ореола. Это позволяет ориентировочно предсказывать местоположение рудных тел, точнее мест, где должны достигаться промышленные концентрации, если график не изменит своего вида. Но если величина C_0 неизвестна, то конкретно величину и положение оруденения, в частности расположение максимальной концентрации, по одним лишь наблюдениям функции $C(r)$ здесь оценить невозможно, так как протяженность графика остается тогда также неизвестной.

Ореолы, описываемые оператором с функцией Гаусса

Основные положения. Мы относительно детально разбирали аномалии, описываемые уравнением (17, § 1, гл. IV). Напомним, что сюда относятся остаточные ореолы, развивающиеся на плоских и выпуклых частях горных склонов, где не происходит перекрытия автохтонных образований более поздним гипергенным материалом, приносимым водными потоками, ветром или поступающим в виде осыпей и т. д. При этом предполагается также отсутствие существенной гравитационной дифференциации и крутое падение рудных тел по отношению к сравнительно пологому склону (чтобы можно было пренебречь осложнениями, связанными с различными скоростями сползания рыхлых образований на разных глубинах).

Тем же уравнением описываются и диффузионные ореолы в однородных по D коренных породах, когда их формирование происходит без существенного перехода вещества μ из подвижных форм в неподвижные. При этом подвижные формы могут быть не обязательно растворами — они могут быть представлены и твердыми частицами (например, пылеобразными охрами, «расползающимися» по трещинам во вмещающих породах).

Для всех этих случаев при краевом условии $C(r)|_{t=0} = C_0(\rho)$ для всех $r = \rho \in V$, где V — неограниченное пространство, мы получили выражение (см. § 3, гл. IV):

$$C(r) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi} \cdot \sigma)^N} \int_V C_0(\rho) \cdot \exp(-|r-\rho|^2/(2\sigma_D^2)) dV, \quad (9)$$

где N — размерность пространства V . При отборе проб из рыхлых образований величина $C(r)$ в левой части равенства может быть заменена эквивалентной ей величиной C_d/k_d .

Беря производную выражения (9) по V , найдем составляющую величины $C(r)$, обусловленную переносом к точке r вещества μ из каждой единицы объема dV , включающего точку ρ :

$$\frac{\partial C(r)}{\partial V} = \frac{1}{(\sqrt{2\pi} \cdot \sigma)^N} \cdot C_0(\rho) \cdot \exp(-|r-\rho|^2/(2\sigma_D^2)). \quad (10)$$

Правая часть выражения (10) является произведением (действием) оператора

$$p(r-\rho) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_D)^N} \cdot \exp(-|r-\rho|^2/(2\sigma_D^2))$$

на исходное поле $C_0(\rho)$. Это действие выражается в переносе вещества

от r к ρ , т. е. оператор p , имеющий вид функции Гаусса, является в данных случаях оператором переноса.

Оценим среднее расстояние, на которое переносит частицы такой оператор. Для этого в общем случае можно воспользоваться формулой (11, § 1). Но, учитывая, что оператор p действует в этом смысле одинаково во всех частях пространства при любых исходных распределениях вещества, можно упростить задачу, ограничившись вычислением величины \bar{R} для случая, когда все вещество μ в количестве Q находится в одной точке ρ . Тогда в формуле (9) $C_0(\rho) \cdot dV = Q$ для элемента dV , включающего точку ρ ; для остальных dV подынтегральное выражение равно нулю, и

$$C(r) = \frac{Q}{(\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_D)^N} \cdot \exp(-|r-\rho|^2/(2\sigma_D^2)). \quad (11)$$

Подставляя это выражение в соответствующую ему формулу (9, § 1), получаем для $N=1$ (при $V = (-\infty, \infty)$) величину

$$\bar{R}_1 = \sqrt{2/\pi} \sigma_D \approx 0,8 \cdot \sigma_D. \quad (12)$$

В качестве характеристики расстояний, на которые производится перенос вещества изучаемым процессом, можно принять также $R^{(\sigma)}$ — среднюю квадратическую величину смещений частиц μ . При помещении всего вещества μ в одну точку ρ имеем, по определению этой величины,

$$R^{(\sigma)} = \sqrt{\frac{1}{Q} \int_V |r-\rho|^2 \cdot C(r) \cdot dV}. \quad (13)$$

При подстановке сюда выражения (11) при $N=1$ получаем среднюю квадратическую величину проекций смещений частиц μ на прямую линию: $R_1^{(\sigma)} = \sigma_D$ т. е. параметр $\sigma_D = \sqrt{2DT}$ есть средняя квадратическая величина проекций смещений частиц на прямую.

Аналогично, задаваясь $N=2$ и 3 , можем найти величины \bar{R}_s , \bar{R}_V , $R_s^{(\sigma)}$, $R_V^{(\sigma)}$, но проще выразить эти величины через \bar{R}_1 и $R^{(\sigma)}$ по соотношениям (11а и 11б, § 1).

Относительно распределены и важны для практики ореолы рассматриваемого типа над рудными телами конечной мощности и протяженности. Тогда даже в простейшем случае размеры рудных тел, наряду с параметром σ_D , составляют в совокупности не менее двух параметров, нелинейно входящих в формулу, описывающую ореол. В таком случае нельзя назвать стандартное преобразование, переводящее кривую концентраций по профилю наблюдений в прямую. Следовательно, здесь неприменим столь простой прием интерпретации ореолов, как в разобранный выше случае, когда образование ореолов описывается оператором переноса в виде экспоненты.

Теперь в качестве простейшего выступает способ интерпретации ореолов сравнением распределения концентраций в них с заранее рассчитанными кривыми, т. е. с помощью атласа палеток.

Использование палеток. Чтобы получить атлас палеток приемлемого объема, приходится ограничиваться составлением теоретических кривых для простейших случаев, когда число параметров в функциях $\Phi^*(r) = F^*\{\Phi_0^*(\rho)\}$ минимально. Поэтому для интерпретации палетками приходится расчленивать сложные аномалии на простые, отделяя фон.

Наряду с описанными выше общими способами определения фона, как и в случае ореолов, описывающихся экспоненциальной функцией, при интерпретации аномалий рассматриваемого вида может быть использована специфическая форма графиков. Согласно решениям прямой задачи (см. гл. IV), во многих случаях график аномальных концентраций в полулогарифмическом масштабе должен быть выпуклым, при-

чем в периферической части он выпрямляется (как ветвь параболы). Если же фон не вычтен из наблюдаемых значений, то на графике имеется вогнутая часть. Поэтому в таких случаях фон определяется как наименьшая величина среди тех, вычитание которых из значений $C(x)$ приводит к исчезновению вогнутой части.

Первый (несколько отличающийся от приводимого здесь) вариант палеток для интерпретации ореолов был описан в статье (Дубов, 1964₂).

Палетки построены для случая, когда функция $C_0(\rho)$ в выражении (9) аппроксимируется ступенчатой функцией, принимающей нулевое значение во всех точках, кроме области физического пространства, определяемой произвольными интервалами $(\xi_0 - \rho_x; \xi_0 + \rho_x)$, $(\eta_0 - \rho_y; \eta_0 + \rho_y)$ и $(\xi_0 - \rho_z; \xi_0 + \rho_z)$ на осях соответственно Ox , Oy и Oz : в этой области $C(\rho) = \text{const} = C_p$. Иными словами, палетки построены для поля диффузионного рассеяния однородного тела, имеющего форму прямоугольного параллелепипеда с концентрацией C_p вещества μ . Пространство V при этом предполагается неограниченным, но, как уже указывалось, полученные кривые применимы и в случаях, когда это пространство ограничено плоскостью, отражающей диффундирующие частицы, или плоскостью, на которой поддерживается постоянная концентрация μ , при диффузии только перпендикулярно этой плоскости.

Аппроксимация рассеивающегося тела прямоугольным параллелепипедом позволяет существенно упростить решение обратной задачи. В то же время такая аппроксимация во многих случаях дает удовлетворительную точность. В частности, распределение концентраций материала столбообразного тела при его двумерном диффузионном рассеянии (в направлениях, перпендикулярных его оси) практически несущественно различается в случаях прямоугольной и эллиптической форм поперечного сечения этого тела (см. § 3, гл. IV).

Будем полагать, что ореол образуется в результате диффузионного рассеяния некоторого тела указанной выше формы, без конвекционного смещения. Фактическое наличие такого смещения будет учитываться особо.

Одномерные ореолы. Поместим начало координат в центр рассеивающегося тела. Согласно решению прямой задачи, в случае диффузии только параллельно оси Ox , при указанных выше краевых условиях,

$$C = \frac{1}{2} C_p \left[\Phi \left(\frac{p-x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p+x}{\sigma_D} \right) \right], \quad (14)$$

где $C = C(x)$, $p = p_x$.

Полагая $x=0$, получаем выражение для максимального значения C в ореоле.

$$C_s = C_p \cdot \Phi \left(\frac{p}{\sigma_D} \right), \quad (15)$$

откуда

$$C_p = C_s / \Phi \left(\frac{p}{\sigma_D} \right). \quad (16)$$

Подставляя это выражение в равенство (14), получаем формулу, в которой число параметров исходного поля на единицу меньше:

$$C = \frac{C_s}{2\Phi \left(\frac{p}{\sigma_D} \right)} \cdot \left[\Phi \left(\frac{p-x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p+x}{\sigma_D} \right) \right]. \quad (17)$$

Отсюда получаем:

$$\lg C = \lg C_s + \lg \left\{ \frac{1}{2\Phi \left(\frac{p}{\sigma_D} \right)} \cdot \left[\Phi \left(\frac{p-x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p+x}{\sigma_D} \right) \right] \right\}.$$

Согласно последнему выражению, при вычерчивании теоретических кривых и соответствующих им практических графиков в масштабе, линейном для расстояний и логарифмов концентраций, их форма зависит только от двух параметров: p и σ_D . Изменение C_s приводит лишь к параллельному смещению таких кривых и графиков без изменения их формы. Поэтому для интерпретации практических графиков используются кривые C/C_s , совпадающие с кривыми C при $C_s=1$.

Согласно (17)

$$C/C_s = \frac{1}{2\Phi\left(\frac{p}{\sigma}\right)} \cdot \left[\Phi\left(\frac{p-x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p+x}{\sigma_D}\right) \right]. \quad (18)$$

Пусть L — условная единица длины, используемая для оси Ox палеток. Напомним, что L — это расстояние на местности, соответствующее отрезку между двумя соседними метками на оси абсцисс палетки. Если этот отрезок равен 1 см, то L — линейный масштаб чертежа в обычном смысле. Например, при числовом масштабе 1:2000 $L=20$ м; тогда точка ореола, отстоящая на 60 м от максимума, изобразится точкой $x/L=3$ на оси абсцисс палетки.

Совокупность параметров $(p/\sigma_D, \sigma_D/L)$ взаимно однозначно связана с совокупностью параметров (p, σ_D) . Это использовано при построении палеток: на одном листе приводятся кривые с фиксированной величиной p/σ_D и разными значениями σ_D/L (набор 1 прилагаемого атласа*). Значения σ_D/L смежных кривых отличаются достаточно мало (на 0,2) для того, чтобы с точностью до графического построения можно было проводить, в случае необходимости, линейную интерполяцию. Диапазон значений σ_D/L (от 0,8 до 6,0) выбирался таким, чтобы в области $(C_s; 0,001 C_s)$ кривые имели форму, удобную для интерпретации: при слишком малых значениях σ_D/L кривые практически не различаются из-за становящейся визуально одинаковой слишком большой крутизны их ветвей; при слишком же больших значениях σ_D/L кривые становятся приближенно горизонтальными, что также неудобно для их разделения. Кроме того, тогда палетки становятся неудобными из-за больших размеров.

Значения p/σ_D смежных палеток отличаются на 0,25, что также позволяет проводить линейную интерполяцию с точностью до графического построения. Диапазон значений p/σ_D (от 0,25 до 2,0) выбран на основании сказанного при решении прямой задачи в гл. IV и статье (Дубов, 1964₂): при $p/\sigma_D \leq 0,25$ действует принцип эквивалентности, когда при современных средствах наблюдений фактические кривые C не отличаются друг от друга по форме. Теоретическое относительное различие величин C/C_s для таких значений p/σ_D не превышает 6% от этих величин. Согласно решению прямой задачи, при этом вместо формулы (17) может использоваться более простая: $C = C_s \cdot \exp(-x^2/(2\sigma_D^2))$, что и сделано при построении палетки. При $p/\sigma_D \geq 2$ кривая C может быть разделена на две ветви, каждая из которых отражает распределение концентраций в области одной из границ рассеивающегося тела:

$$C = C_p \cdot \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sigma_D}\right) \right] = C_s \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sigma_D}\right) \right]. \quad (19)$$

Эта формула может быть получена из формулы (17) при $p/\sigma_D \rightarrow \infty$, с переносом нулевой точки оси Ox на границу рассеивающегося тела при

* В связи с симметрией приводятся только правые ветви кривых. Для интерпретации левых ветвей фактический график либо палетка поворачивается обратной стороной, для чего графики или палетки вычерчиваются на прозрачной бумаге. Масштаб всех прилагаемых к книге изображений палеток уменьшен вдвое по сравнению с указанным в тексте.

ориентировании положительной полуоси в сторону вмещающих пород. Теоретические кривые C/C_s , рассчитанные по формуле (19), приведены в наборе 2 прилагаемого атласа (этот набор состоит из одной палетки).

Параметр σ_D/L практического графика зависит от выбранной единицы L . Поэтому, меняя масштаб изображения графика, всегда можно добиться, чтобы он попал в нужный диапазон по этому параметру.

По оси абсцисс палеток отложены значения x/L в арифметическом масштабе, по оси ординат — значения C/C_s в логарифмическом масштабе при модуле $M=4$ см. Поскольку значения C/C_s численно равны значениям C при $C_s=1$, а изменение C_s приводит при названном масштабе изображения лишь к смещению кривой C по вертикали, то это означает, что практические кривые можно непосредственно сравнивать по форме с теоретическими кривыми, без пересчета к значениям C/C_s . Требуется лишь, чтобы величины M (масштабы по оси ординат) палеток и практических кривых совпадали. Смещение же практической кривой по вертикали отражает фактическую величину C_s . Напомним, что указанный тип масштаба изображения, обеспечивающий такую возможность, удобен и в отношении фильтрации помех: для тех случаев, когда шумы распределены приблизительно логнормально: это облегчает аппроксимацию практических данных теоретическими кривыми.

На каждой из палеток, рассчитанных по формуле (17), указывается соответствующая отношению r/σ_D величина коэффициента разубоживания $K=C_p/C_s=1/\Phi\left(\frac{p}{\sigma_D}\right)$ и проведена горизонтальная линия, пересекающая ось ординат палетки на отметке 0,01 K (выбор этой отметки обусловлен соображениями удобства пользования палетками). Для случая, соответствующего формуле (19), $K=1$, т. е. для тел бесконечной мощности концентрация C_s вещества μ в максимуме ореола (в остаточном ореоле — после умножения на k_n или деления на k_d) равна концентрации C_p в рассеивающемся теле.

При предварительном выделении графиков для интерпретации используются их характерные черты. В отличие от кривых, рассмотренных в предыдущем параграфе, кривые концентраций в ореолах данного типа пересекают ось ординат под прямым углом. В полулогарифмическом масштабе эти кривые имеют вид, напоминающий параболу (в случае $r/\sigma_D \rightarrow 0$ они сходятся к параболе), а в линейном масштабе они колоколообразны.

Согласно сказанному выше, разделение рассеивающегося тела осевой плоскостью, отражающей диффундирующие частицы, не изменяет формы ореола. Следовательно, можно считать, что каждая из ветвей интерпретируемого графика отображает ореол рассеяния соответствующей половины тела, имеющей мощность r , или же ореолу обособленного тела (с полной мощностью r) при наличии у этого тела (и ореола) одной граничной отражающей плоскости. Поэтому, а также в связи с фактическими различиями разных ветвей графиков C для многих ореолов удобно говорить о величине r для определенной ветви графика, а полную мощность тел, рассеивающихся в обе стороны, определять как сумму значений r , найденных для каждой ветви в отдельности.

Интерпретация практического графика концентраций с помощью описанных палеток производится следующим образом.

График (точнее, его интерпретируемая ветвь, начиная от максимума вправо) вычерчивается в полулогарифмическом масштабе — линейном по оси абсцисс и логарифмическом по оси ординат, с тем же модулем, с которым построены палетки (для этого можно использовать ось ординат какой-либо палетки как масштабную линейку). Масштаб по оси абсцисс графика подбирается так, чтобы при совмещении максимумов графика и теоретических кривых прилегающая к максимуму

часть графика находилась внутри области, занимаемой теоретическими кривыми. Это будет обеспечено, если на уровне концентрации, равной $0,1 C_s$, интерпретируемая ветвь графика наклонена к оси абсцисс под углом примерно $33-45^\circ$ (оптимально $40-45^\circ$), тогда график наиболее рельефен и удобен для интерпретации. Это делается на глаз, ориентировочно. Построенный график сравнивается с палетками из набора 1 прилагаемого атласа. Для сравнения график или палетки должны быть выполнены на тонком прозрачном материале. Предположим, что на таком материале выполнен график. Тогда он накладывается на палетку так, чтобы его ось Ox была параллельна оси абсцисс палетки. Если максимум графика известен, то точка C_s его совмещается при этом с точкой, к которой сходятся в своих максимумах кривые на палетке. Если же этот максимум не известен (из-за отсутствия соответствующих проб или существенного влияния шумов), то соответственно алгоритмам аппроксимации при указанной ориентировке оси Ox выбирается теоретическая кривая и та ее часть, которая по форме наилучшим образом соответствует графику. Выбранная кривая отсекает на оси ординат графика искомую величину C_s .

Предполагая операцию аппроксимации выполненной, далее будем приближенно считать, что график не имеет шумовой составляющей.

Если при наложении практический график совпал с одной из кривых палетки или занял промежуточное положение между двумя смежными кривыми палетки, то это означает, что параметр ρ/σ_D фактического графика совпадает с соответствующим параметром палетки. Такое положение на рис. 60 занимает график I. Поскольку график проходит примерно посередине между кривыми с величинами $\sigma_D/L=3$ и $\sigma_D/L=3,2$, то можно заключить, что в данном случае $\sigma_D/L=3,1$. Предположим, что график был построен в числовом масштабе $1:1000$, т. е. 1 см на оси абсцисс графика соответствует 10 м на местности ($L=10$ м). Тогда получаем величину параметра рассеяния: $\sigma_D=3,1 \cdot L=31$ м. Со-

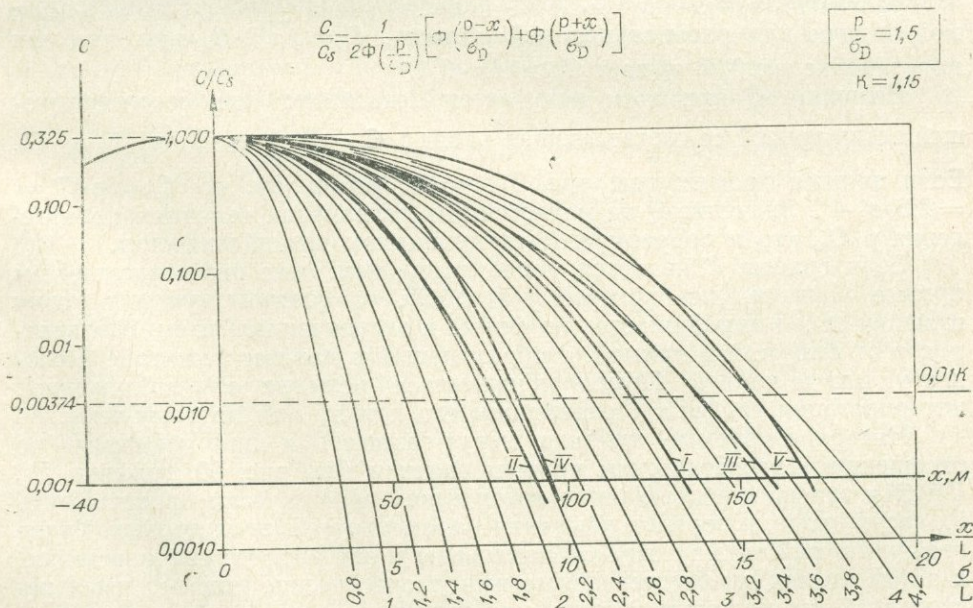


Рис. 60. Схема сравнения фактических графиков концентраций (жирные линии) с теоретическими кривыми (тонкие линии) в случае ореола пластообразного тела.

I — фактическая кривая с величиной ρ/σ_D , соответствующей палетке; II, III — фактические кривые с величиной ρ/σ_D , меньшей, чем у палетки; IV, V — фактические кривые с величиной ρ/σ_D , большей, чем у палетки.

гласно надписи на палетке, $p/\sigma_D = 1,5$. Подставляя сюда только что определенное значение σ_D , получим величину $p = 1,5 \cdot 31 = 46,5$ м.

Значение $C_s \cdot K$, равное в одномерном случае величине C_p , можно получить, умножая величину C_s графика на значение K , указанное на палетке. Еще проще значение C_p можно получить, умножая на 100 значение концентрации, отсекаемое на оси ординат графика линией $0,01 K$ палетки. Последний прием позволяет узнать C_p без (или до) нахождения C_s . В разбираемом примере $C_s K = 0,374$.

Если параметр p/σ_D фактического графика существенно отличается от величины, для которой построена палетка, то график пересекает кривые палетки вполне определенным образом. Так, например, графики *II* и *III* (см. рис. 60), если проследивать их сверху вниз, пересекают последовательно кривые с различными величинами параметра σ_D/L . При этом в области максимума упомянутые графики опускаются несколько круче к оси абсцисс, чем пересекаемые ими теоретические кривые, а затем, ниже, оказываются более пологими, чем эти кривые. Образно говоря, область максимума у таких графиков оказывается более узкой, чем у теоретических кривых палетки, а график в целом — более «плоским», менее выпуклым, чем пересекаемые им кривые палетки.

Такие признаки свидетельствуют о том, что графики *II* и *III* нужно интерпретировать с помощью палетки, построенной при меньшей величине параметра p/σ_D , чем в данном случае.

Если график совпадает с одной из теоретических кривых с параметром $p/\sigma_D \leq 0,25$, то в силу действия принципа эквивалентности нельзя назвать конкретные величины p и C_p . Но тогда можно назвать верхнюю оценку для p : если $p/\sigma_D \leq 0,25$, то $p \leq 0,25 \sigma_D$. Можно указать и нижнюю оценку для исходной концентрации: всегда $C_p = C_s \cdot K$, причем при $p/\sigma_D \leq 0,25$ $K = \frac{1}{\Phi\left(\frac{p}{\sigma_D}\right)} \geq 5,06$, т. е. в области действия принципа

эквивалентности $C_p \geq 5,06 C_s$ (согласно упоминавшимся решениям прямой задачи для рассматриваемой области, $C_p = \sqrt{\pi/2} \cdot C_s \cdot \sigma_D/p$, что при подстановке $p \leq 0,25 \sigma_D$ дает $C_p \geq \sqrt{8\pi} \cdot C_s$).

Величина Q при этом получается однозначно: для соответствующей ветви кривой ее составляющая равна $p \cdot C_p = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot \sigma_D \cdot C_s \approx 1,25 \sigma_D \cdot C_s$.

Если ширина промежутка, где $C(\xi) = C_p$, равна $2p$, то $Q = 2p \cdot C_p = 2,5 \cdot \sigma_D \cdot C_s$. Значение Q не меняется при сохранении величины произведения $p \cdot C_p$, что и подразумевается принципом эквивалентности.

Если график C является менее выпуклым, чем пересекаемые им кривые палетки, для которой $p/\sigma_D \leq 0,25$, то соответствующий этому графику ореол приближается по форме к экспоненциальному. В зависимости от близости к прямой, отображающей в данном масштабе экспоненту, или к кривой Гаусса принимается решение о приближенной интерпретации графика с отнесением его к тому или другому типу.

Интерпретируемые графики могут занимать и иное положение по отношению к теоретическим кривым палетки (см. рис. 60, графики *IV*, *V*). Эти графики пересекают теоретические кривые, если проследивать их сверху вниз, в порядке убывания параметра σ_D/L этих кривых. Такие графики в районе максимумов наклонены к оси абсцисс сначала менее, а затем более, чем пересекаемые ими теоретические кривые, имея несколько более широкую область максимума, т. е. они более выпуклы.

Подобные признаки свидетельствуют о том, что для интерпретации графиков нужно перейти к палеткам с большей величиной параметра p/σ_D .

Может оказаться, что интерпретируемый график более выпукл, чем пересекаемые им кривые палетки с наибольшим значением p/σ_D для

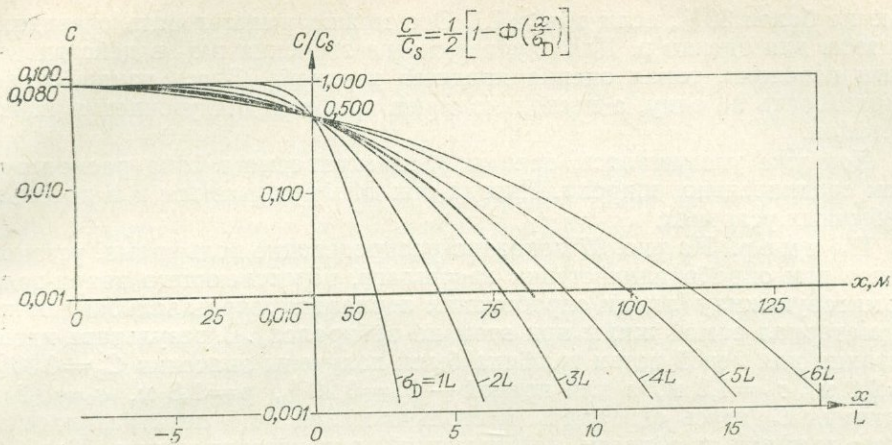


Рис. 61. Схема сравнения фактического графика концентраций (жирная линия) с теоретическими кривыми (тонкие линии) в случае ореола близ контакта.

описываемого набора. Тогда график интерпретируется с помощью палетки набора 2. Это делается следующим образом.

График накладывается на палетку так, чтобы его ось Ox была параллельна оси абсцисс палетки и чтобы, находясь в области, занимаемой теоретическими кривыми, он пересекал наименьшее количество из них. Тогда ось ординат палетки пересекает ось абсцисс графика в точке, левее которой принимается $C_0(\xi) = C_p$, а правее $C_0(\xi) = 0$. Величина C_p в таких случаях приблизительно равна величине C_s , оцениваемой по графику непосредственно или по точке пересечения оси ординат графика верхней горизонтальной линией палетки. Если график имеет две ветви, то, интерпретируя их обе, получим положение двух границ области, где принимается $C_0(\xi) = C_p$. Расстояние между ними приблизительно равно сумме значений r , которые были бы получены с помощью палеток набора 1, построенных для соответствующих величин r/σ_D . Если начало координат находится в максимуме ореола, то ось ординат палетки при указанном совмещении отсекает на оси абсцисс практического графика величину r .

На рис. 61 показана интерпретация ореола рассматриваемого вида. Здесь $\sigma_D = 3,4 L$. Если, например, $L = 5$ м, то $\sigma_D = 17$ м. Поскольку здесь $r/\sigma_D \geq 2$ и $K \approx 1$, то в данном случае величина C_p может быть принята равной значению C_s , т. е. 0,08%. Ось ординат палетки на оси абсцисс графика отсекается величина $r = 43$ м.

В случаях, когда влияние шумов невелико и аппроксимация ореолов теоретическими кривыми не требуется, а также при необходимости ориентировочных оценок ореолов и отсутствии палеток, можно воспользоваться некоторыми численными соотношениями. Так, в области действия принципа эквивалентности можно принять, что, как и в функции Гаусса, величина σ_D приблизительно равна расстоянию между точками, где $C = C_s$ и $C = 0,6 C_s$. Можно использовать и другие точки, удаленные от максимума на различные расстояния, пользуясь таблицей Гаусса*, а затем брать некоторые средние оценки σ_D . Если в действительности величина r/σ_D существенна, то получаемые таким образом оценки являются максимальными для σ_D , так как с увеличением r точка с выбранным значением C сдвигается вправо.

При больших r/σ_D границе области с $C_0(\xi) = C_p$ соответствует $C = \frac{1}{2} C_s$. Можно подсчитать, что это равенство соблюдается с погрешно-

* Необходимые соотношения можно получить и с помощью первой палетки набора 1, отображающей функцию Гаусса.

стью не более 30%, если $r/\sigma_D \geq 1,1$. Это можно использовать очевидным образом для оценки r . Для случаев, когда значения r/σ_D в действительности невелики, такая оценка является верхней. Здесь также можно использовать не одну, а несколько точек графика для уточнения интерпретации.

Как уже упоминалось, ореолы рассматриваемого типа распространены сравнительно широко. Иногда они обнаруживаются и в довольно необычных условиях.

Пример. На рис. 62 показано распределение вольфрама, установленное при опробовании стенки кварц-вольфрамитовой жилы (линии опробования перпендикулярны зальбандам жилы, материал самой жилы при этом не отбирался). В результате интерпретации для левой ветви графика были получены значения $C_p = 0,36\%$, $r = 2,1$ м, $\sigma_D = 1,2$ м, а для правой — $C_p = 0,26\%$, $r = 1,8$ м, $\sigma_D = 0,9$ м. Величина C_Φ здесь оказалась настолько малой, что не отразилась на форме графика в области, используемой для интерпретации. Поэтому здесь было принято $C_\Phi \approx 0$. Полученные значения C_p и r дают общую линейную продуктивность (метропроцент) ореола $Q_1 = 0,36 \cdot 2,1 + 0,26 \cdot 1,8 = 1,23$. В то же время мощность жилы $2r = 4$ см, концентрация вольфрама в ней (средняя по сечению в соответствующем месте), согласно данным специального опробования, составляет 2%, что дает $Q_1 = 0,08$ м·%. Материал жилы монолитен, без каких-либо следов разрушения содержащегося в нем вольфрамита. Концентрации вольфрама в кварце, окружающем зерна вольфрамита, ниже порога чувствительности применявшегося спектрального анализа ($< 0,003\%$). Окружающий же жилу гранит визуально однороден, равномерно каолинизирован и мусковитизирован. Таким образом, здесь ореол образован явно за счет диффузии вольфрама не из жилы, а из гораздо более мощной зоны обогащения, примыкавшей к жиле с обеих сторон. Вероятно, эта зона образовалась до заполнения рудоподводящего канала плотным жильным материалом — тогда, когда вольфрам выпадал из растворов, проникавших в окружавшие канал граниты, а в канале температура растворов была слишком высокой для образования жилы. Последующее отложение жильного материала прекратило доступ вольфрама в гранит около нее, а зальбанды жилы стали играть роль отражающих границ для частиц вольфрама, продолжавших диффузионную миграцию. Поэтому

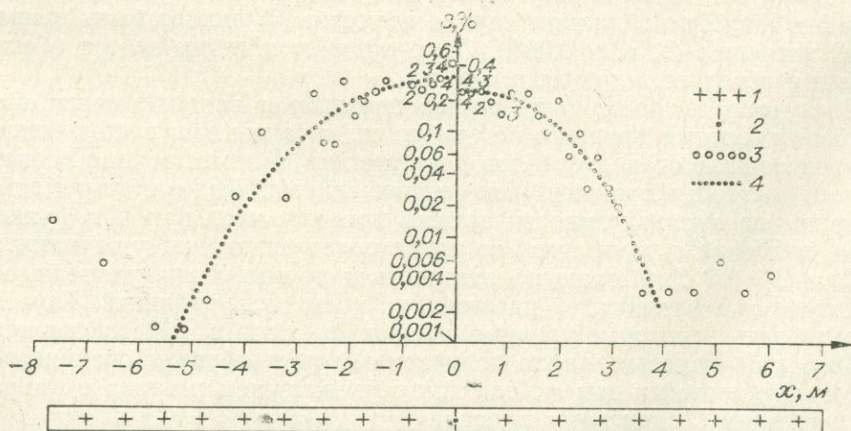


Рис. 62. Ореол вольфрама около кварц-вольфрамитовой жилы (месторождение Дедова гора, Забайкалье, данные автора). Масштаб полулогарифмический.

1 — лейкократовые граниты; 2 — кварц-вольфрамитовая жила; 3 — результаты спектрального анализа проб на вольфрам (цифры над кружками вблизи максимума ореола обозначают количество отобранных проб, результаты по которым усреднены для получения более точной величины концентрации); 4 — статистически сглаженная (медианная) кривая фактического распределения вольфрама.

здесь величина p есть мощность зоны первоначального обогащения с соответствующей стороны жилы.

При более детальном исследовании со спектральным анализом проб на несколько элементов было установлено, что около описанной жилы первоначально образовалась зона обогащения не только вольфрамом, но и висмутом, серебром. При этом интерпретация графиков концентраций вольфрама и висмута дала приближенно такие же величины p , как указано выше, а серебро мало диффундировало из этой зоны, и она выделяется по их повышенным концентрациям (Дубов, Найгебауэр, Соловьева, 1966).

Неожиданным здесь явилось то, что вольфрам и висмут содержатся в ореоле в высоких концентрациях (порядка сотых, а для вольфрама даже до десятых долей процента). Пористость гранита составляет не более нескольких сотых долей его объема. Поэтому предположение о том, что такие концентрации созданы диффузией в растворах без поглощения, требует невозможно высоких концентраций вольфрама в растворах (порядка целых процентов и даже десятков процентов). Формы нахождения серебра и висмута не установлены. Относительно детально изучен вольфрам.

Согласно микроскопическому изучению, вольфрам здесь содержится в виде зерен вольфрамита, иногда достигающих в диаметре десятых долей миллиметра, но преимущественно более мелких (порядка сотых долей миллиметра и меньше). Эти зерна не имеют заметной избирательной приуроченности к каким-либо минералам гранитов, что свидетельствует об отсутствии специфической хемосорбции.

Все сказанное позволяет составить некоторое суждение относительно особенностей диффузии вольфрама в рассматриваемом случае. Отчасти это могла быть диффузия в виде микроскопических зерен вольфрамита, переместившихся по порам и трещинам гранитов за время существования месторождения (с предверхнеюрского периода) на указанные существенные расстояния с последующим частичным укрупнением зерен при известном в термодинамике процессе роста относительно крупных кристаллов в смеси за счет растворяющихся мелких (Базаров, 1961). Более вероятным представляется процесс, который можно назвать диффузией с обратным поглощением: несмотря на малую растворимость, атомы вольфрама с некоторой вероятностью переходят в раствор из зерен вольфрамита, движутся хаотически в растворе, а через некоторое время оседают на том же или другом зерне или образуют новый центр кристаллизации вольфрамита. Нетрудно видеть, что этот процесс в отношении результирующего макрораспределения вольфрама аналогичен диффузии самих зерен, но более приемлем, так как принято считать, что твердые зерна горной породы, даже весьма мелкие, после ее образования не перемещаются.

Приведенный пример показывает, что форма кривой C при решении обратной задачи может дать интересную информацию о геохимических процессах.

Многомерные ореолы. Согласно свойству композиции процессов диффузии и решению прямой задачи (§ 1, 3, гл. IV), многомерный процесс диффузии без поглощения можно представить как коммутативную композицию одномерных процессов диффузии по каждой координатной оси. Соответственно этому, для нахождения поля $C(\rho)$ можно последовательно исключить влияние одномерной диффузии по каждой из осей, т. е. задача сводится к рассмотренной выше. В двумерном случае

$$C(x, y) = \frac{1}{4} C_p \left[\Phi \left(\frac{p_x - x}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_x + x}{\sigma_D} \right) \right] \cdot \left[\Phi \left(\frac{p_y - y}{\sigma_D} \right) + \Phi \left(\frac{p_y + y}{\sigma_D} \right) \right]. \quad (20)$$

Полагая $x=y=0$, найдем максимальное значение для $C(x, y)$;

$$C_s = C_p \cdot \Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right) \cdot \Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right). \quad (21)$$

Отсюда

$$C_p = \frac{C_s}{\Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right) \cdot \Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right)} = K_x \cdot K_y \cdot C_s, \quad (22)$$

где

$$K_x = 1/\Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right), \quad K_y = 1/\Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right). \quad (23)$$

Следовательно, вместо формулы (20) можно написать:

$$\begin{aligned} C(x, y) &= \frac{1}{4} \cdot \frac{C_s}{\Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right) \cdot \Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right)} \cdot \left[\Phi\left(\frac{p_x - x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_x + x}{\sigma_D}\right) \right] \times \\ &\times \left[\Phi\left(\frac{p_y - y}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_y + y}{\sigma_D}\right) \right] = \frac{1}{2} \left\{ \frac{C_s}{2\Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right)} \cdot \left[\Phi\left(\frac{p_y - y}{\sigma_D}\right) + \right. \right. \\ &\left. \left. + \Phi\left(\frac{p_y + y}{\sigma_D}\right) \right] \right\} \cdot \frac{1}{\Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right)} \left[\Phi\left(\frac{p_x - x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_x + x}{\sigma_D}\right) \right]. \quad (24) \end{aligned}$$

Фиксируя y и полагая $x=0$, находим отсюда, что на линии с выбранным значением y (параллельной оси Ox) максимальная концентрация равна

$$C_{sy} = \frac{C_s}{2\Phi\left(\frac{p_y}{\sigma_D}\right)} \cdot \left[\Phi\left(\frac{p_y - y}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_y + y}{\sigma_D}\right) \right]. \quad (25)$$

Поэтому вместо (24) можем написать:

$$C(x, y) = \frac{1}{2} \cdot \frac{C_{sy}}{\Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right)} \cdot \left[\Phi\left(\frac{p_x - x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_x + x}{\sigma_D}\right) \right], \quad (26)$$

$$C(x, y)/C_{sy} = \frac{1}{2\Phi\left(\frac{p_x}{\sigma_D}\right)} \cdot \left[\Phi\left(\frac{p_x - x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p_x + x}{\sigma_D}\right) \right]. \quad (27)$$

Это выражение совпадает по форме с выражением (18). Следовательно, в данном случае можно применить разобранный выше прием интерпретации: по профилю, параллельному оси Ox , с помощью соответствующей палетки найти оценки величин σ_D , p_x , K_x и $C_{py} = K_x \cdot C_{sy}$.

Аналогично, используя график концентраций по профилю, параллельному оси Oy и пересекающему ось Ox в точке x , найдем оценки σ_D , p_y , K_y и $C_{px} = K_y \cdot C_{sx}$.

Теперь нетрудно найти C_p , подставляя найденные параметры σ_D , p_x и p_y в формуле (20), задаваясь произвольными значениями x , y и используя величину C в точке (x, y) .

Оценки величины σ_D , найденные при интерпретации графиков по профилям, параллельным осям Ox и Oy , могут существенно различать-

ся. Обозначим их соответственно σ_x и σ_y . Это различие может быть обусловлено действительным различием и ошибками. При отсутствии указаний на предпочтительность какой-либо из этих оценок они используются для вычисления C_p как равноправные, для чего σ_x подставляется вместо σ_y в ту часть формулы (20), которая отражает диффузионное рассеяние параллельно оси Ox , а σ_y — в ту часть, которая отражает рассеяние параллельно оси Oy :

$$C_p = 4 \cdot C(x, y) / \left\{ \left[\Phi\left(\frac{p_x - x}{\sigma_x}\right) + \Phi\left(\frac{p_x + x}{\sigma_x}\right) \right] \cdot \left[\Phi\left(\frac{p_y - y}{\sigma_y}\right) + \Phi\left(\frac{p_y + y}{\sigma_y}\right) \right] \right\}. \quad (28)$$

Выбирая ряд различных точек (x, y) для таких вычислений, можно найти медианную оценку для C_p .

Интерпретация упрощается, если интерпретационные графики построены по осям Ox и Oy (совпадающим с короткой и длинной осями ореола). При отсутствии фактических наблюдений по этим осям необходимые значения $C(x, y)$ могут быть сняты с плана изоконцентрат.

Тогда $C_{sx} = C_{sy} = C_s$, и для получения оценки C_p , согласно формуле (22), достаточно перемножить K_x , K_y и C_s . То же самое можно получить, если величину C_{py} , найденную при интерпретации графика по оси Ox как результат исключения рассеяния параллельно этой оси, умножить на величину K_y , полученную при интерпретации графика по оси Oy (или K_x умножить на C_{px}).

Равенство $C_{sx} = C_{sy} = C_s$ существенно сужает область неопределенности при оценке величины C_s , позволяя использовать для этого одновременно графики C по обеим осям. Обычно это делается с достаточной точностью визуальным вычерчиванием графиков на общих осях (рис. 63, II).

В связи с производимой аппроксимацией действительного распределения $C(\rho)$, иногда имеющего сложную форму, оценки C_p и ρ могут существенно отличаться от соответствующих геологических величин, принимаемых по результатам горных работ. Интегральная же величина Q в принципе оценивается точнее.

Неоднозначность интерпретации, вызываемая невозможностью разделить сливающиеся ореолы различных объектов, расстояние между

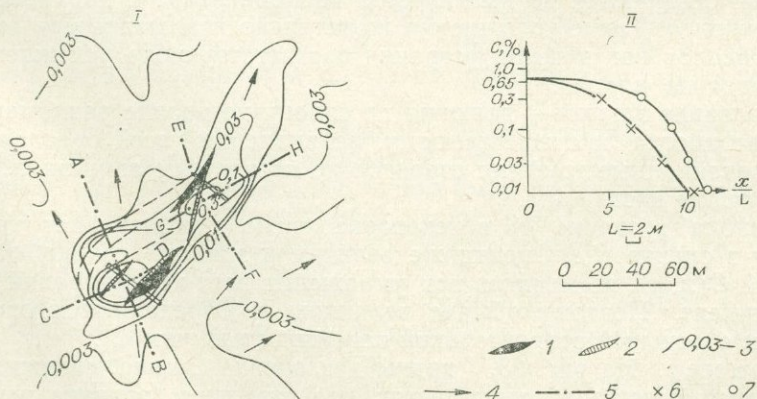


Рис. 63. План изоконцентрат (I) и графики концентраций свинца (II) в верхнем горизонте делювия (месторождение Курултыкен, Забайкалье); план изоконцентрат — по данным Е. М. Квятковского и А. Г. Андрианова; рудные тела — по данным Л. В. Жукова и Н. И. Сухенко).

1 — полиметаллические руды с концентрацией свинца свыше 0,4%; 2 — зоны дробления и оруденелые вмещающие породы (филлитовидные сланцы) с концентрацией свинца 0,2—0,4%; 3 — концентрации свинца в металлометрических пробах, %; 4 — направление склона дневной поверхности; 5 — интерпретационные профили; 6 — концентрации свинца на профиле АВ; 7 — концентрации свинца на профиле СД.

которыми невелико по сравнению с величиной σ_D , непосредственно следует из решений прямой задачи, приведенных в гл. IV. При современной точности оценок для $C(r)$ (при $\delta_{|\Delta|}$ порядка десятков процентов) исходные тонкие пластообразные тела могут довольно уверенно различаться, если расстояние между ними не меньше $2,5-2,8\sigma_D$. Это вызвано тем, что теоретически при указанных расстояниях уменьшение $C(r)$ между одинаковыми тонкими пластообразными телами составляет $13-26,3\%$ от величины максимума.

При сближении тел разной мощности разделение ореолов становится еще менее заметным. По отношению к мощным телам разрешающая способность несколько лучше.

При значительной протяженности рассеивающегося тела (по сравнению с σ_D) желательно находить величины C_p , ρ и σ_D по ряду интерпретационных профилей, пересекающих ореол, для суждения об изменении этих величин в пространстве. Если интерпретационный профиль пересекает ось ореола под острым углом α , то для нахождения величины ρ ее оценку, полученную по профилю, нужно спроектировать на перпендикуляр к оси тела, т. е. умножить на $\cos \alpha$.

Если все размеры рассеивающегося тела велики, то даже при сложной форме его границ интерпретация может быть произведена с высокой относительной точностью по профилям, перпендикулярным этим границам.

Особенности интерпретации остаточных вторичных ореолов. Напомним, что остаточные вторичные (элювиально-делювиальные) ореолы, доступные для наиболее распространенного приповерхностного опробования, образуются на выпуклых и плоских частях горных склонов (Соловов, 1959).

На вогнутых частях склонов в связи с уменьшением их крутизны скорость водотоков и обвалов уменьшается по мере движения вниз, и частицы рыхлых образований, несомые сверху, задерживаются, перекрывая автохтон. При этом они располагаются по пути своего движения, образуя шлейфы. Форма шлейфов практически не зависит от формы тел, из которых возникли такие частицы.

На склонах сложной формы довольно часто ореолы переходят в шлейфы, особенно в нижних частях, где склоны обычно вогнуты. Эти переходы опознаются по вытянутости изоконцентрат в направлении падения склонов. Такие усложнения желательно исключать при интерпретации ореолов как помехи, устраняя соответствующие усложнения изоконцентрат на планах.

Сползание элювия — делювия по склону не вполне равномерно. Это приводит иногда к существенному искривлению осей ореолов. Тогда интерпретационные графики строятся не по прямым линиям, а по соответствующим изогнутым.

Ошибка в оценке k_h в некоторое число раз вызывает такую же ошибку в оценке C_p . Оценки же величин ρ зависят только от формы функций $C(x, y)$, не меняясь при умножении всех концентратий на один коэффициент. Поэтому обычно величины ρ определяются описанным методом с меньшей относительной погрешностью, чем C_p .

Пример. На рис. 63, I видны два ореола свинца, слившихся вместе в своих периферических частях, что отражает наличие двух сближенных рудных тел. Через максимумы этих ореолов вкрест их вытянутости проведены интерпретационные профили АВ и ЕF, а по вытянутости — профили CD и GH. На рис. 63, II показаны графики концентратий, построенные по описанному плану изоконцентрат для интерпретационных профилей АВ и CD юго-западного ореола с увеличением масштаба расстояний в 10 раз.

Изоконцентраты, ход которых вблизи интерпретационных профилей явно нарушен наложенными случайными искажениями, для построения

интерпретационных графиков сглаживались соответственно общему их ходу или не принимались во внимание. В правой части плана хорошо видно, как с удалением от максимума вниз по склону ореолы местами переходят в шлейфы и потоки рассеяния, в связи с чем изоконцентраты вытягиваются по указанному стрелкой местному направлению склона. Такие отклонения изоконцентрат от нормального их положения в ореоле также исключались при построении интерпретационных графиков.

По профилю АВ определялось среднее расстояние от максимума ореола точек пересечения левой и правой частей профиля каждой из учитываемых изоконцентрат, и интерпретируемый график проводился по этим усредненным значениям. На профиле CD использована лишь юго-западная часть, так как в северо-восточной части профиля ореол усложнен влиянием соседнего рудного тела.

В данном случае было принято $C_{\phi} \approx 0$. В действительности величина C_{ϕ} здесь имеет порядок десятитысячных — первых тысячных долей процента, но в связи с относительно высокими концентрациями в окрестности максимума ореола, используемой для интерпретации, исключение ее несущественно сказывается на форме кривой C в полулогарифмическом масштабе. Величина k_h принята равной единице.

Результаты интерпретации графика концентраций свинца по профилю АВ дали $\sigma_D = 6$ м, $r_x = 6$ м (практический график совпадает с теоретической кривой из набора 1 для $\sigma_D = 3L$, $r = \sigma_D$, $K = 1,46$), а по профилю CD — $\sigma_D = 4$ м, $r_y = 13,4$ м (практический график почти совпадает с теоретической кривой из набора 2 для $\sigma_D = 2L$, и при их совмещении ось ординат теоретических кривых пересекает ось абсцисс практического графика в точке $x = 6,7L$). Максимальная концентрация свинца в ореоле определяется, как упоминалось, для повышения точности не по единичным пробам, а по графикам, причем одновременно по обоим профилям; она оказалась равной 0,65%. Поскольку $r_y > 2\sigma_D$, можно принять $K_y = 1$ и $C_p = K_x \cdot C_s = 0,95\%$.

Фактически, по данным разведки горными выработками, $r_x = 4$ м, $r_y = 16$ м, $C_p = 0,86\%$ (опробование по канаве, пересекающей рудное тело близ профиля АВ).

Аналогичным образом были проинтерпретированы графики концентраций свинца по профилям EF и GH, которые дали для северо-восточного рудного тела $\sigma_D = 6$ и 10 м, $r_x = 1,2$ м, $r_y = 13$ м, $C_p = 2,3\%$ при фактических параметрах, определенных по данным разведки горными выработками, $r_x = 1,8$ м, $r_y = 18$ м, $C_p = 1,1\%$ (опробование по канаве близ профиля EF).

Были подвергнуты количественной интерпретации также ореолы над двумя другими полиметаллическими рудными телами того же месторождения. При этом для одного из тел были получены $\sigma_D = 20$ и 21 м, $r_x = 4$ м, $r_y = 56$ м, $C_p = 2\%$ при фактических $r_x = 4$ м, $r_y = 48$ м; значение C_p не определено для верхнего горизонта рудного тела, но, судя по результатам бурения, имеет порядок 1 ÷ 3%. Для другого тела при интерпретации было получено $\sigma_D = 15$ и 20 м, $r_x = 3$ м, $r_y = 40$ м, $C_p = 8,3\%$ при фактических $r_x = 1 \div 6$ м (полуширина 6 м достигается в раздуве), $r_y = 43$ м, $C_p = 4,4\%$.

В таких случаях видимая мощность выхода рудного тела под рыхлые образования оценивается как сумма значений r_x , полученных для обеих ветвей кривой C по оси Ox ореола. Протяженность выхода определяется аналогично как сумма значений r_y . Если же интерпретируется только одна ветвь кривой (например, из-за усложнений второй ветви), то названные размеры получают удвоением соответствующих параметров r . То же самое делается, если значение r найдено по кривой C , полученной усреднением ветвей ореола, как было сделано в данном примере.

Как видим, соответствие данных интерпретации ореолов фактическим параметрам тел в этом примере можно считать вполне удовлетворительным, особенно если учесть, что рудные тела имеют форму линз с неравномерным распределением металла при наличии некоторого оруденения в боковых породах. Особенно хорошо определяется протяженность тел, так как она достаточно велика по сравнению с величиной σ_p .

Мощность тел определяется, естественно, с большей относительной погрешностью, но абсолютная ошибка при этом сравнительно невелика: она измеряется десятками долями величины σ_p и остается обычно гораздо меньше расстояния между точками отбора проб, которое влияет на точность проведения изоконцентрат и интерпретации.

Величина концентрации свинца в рудном выходе, определенная по ореолам, в наших примерах оказалась довольно близкой к действительной без введения каких бы то ни было поправочных коэффициентов; зафиксированные расхождения почти полностью можно объяснить уже одним только изменением концентраций свинца в рудном теле по глубине и простиранию.

Это связано, вероятно, с тем, что свинец в верхнем горизонте описанного месторождения содержится в виде охр, плотность которых приблизительно равна плотности рыхлых образований (примерно $1,3 \div 2,7$ г/см³), что при вязкости рыхлых пород практически полностью исключает заметную гравитационную дифференциацию. Распределение свинца по фракциям в опробованном верхнем горизонте делювия примерно равномерное, и отбор в пробы фракции < 1 мм не требовал поправок.

Химические соединения свинца здесь труднорастворимы, т. е. он прочно связан с твердой фазой рыхлых пород и участвует с ней в броуновском движении частиц без дальнейшего поглощения неподвижной фазой (коренными породами).

Аналогичные по точности результаты были получены на нескольких других месторождениях свинца и меди.

При интерпретации ореолов иных элементов или в менее благоприятных геолого-геохимических и геоморфологических условиях можно ожидать, вероятно, более существенные отклонения оценок C_p и r от их действительных величин. Но полученные данные с несомненностью показывают возможность улучшения количественных оценок рудных тел по ореолам по сравнению с распространенной сейчас интуитивной оценкой, когда опытные специалисты в хорошо знакомых им районах указывают только в особо удачных случаях порядок параметров r и C_p .

Даже при ошибках оценок C_p и др. в несколько раз количественная интерпретация ореолов рассмотренного вида при руднопоисковых работах дает возможность отсортировать большое число явно перспективных аномалий. К ним относятся, например, обширные зоны с относительно однородными, заведомо непромышленными низкими концентрациями C_p рудообразующих элементов (при отсутствии данных о возможности появления промышленных концентраций на глубине). Очевидна также возможность использования сведений о некоторых нерудных объектах (например, дайках, контактах пород с разными C_p и т. п.) для геологического картирования и металлогенических построений.

Напомним, что перед интерпретацией желательнее производить сопоставление изображения геохимической аномалии в изолиниях (на плане) с топографической картой или отметками о направлении и углах падения горных склонов в соответствующем месте. Если аномалия находится на вогнутой части склона или имеет форму, согласующуюся с направлением падения склона и углублениями (желобами) на нем, то такая аномалия классифицируется как шлейф. Интерпретировать ее по правилам, разработанным для остаточных ореолов, нельзя.

Аномалии других видов

1. Довольно часто наблюдаются аномалии, являющиеся комбинацией аномалий рассмотренных видов.

В частности, при слоистой среде аномалии экспоненциального типа на изображениях в полулогарифмическом масштабе выглядят ломаными линиями (см. решения прямой задачи § 2, гл. IV). Слои с относительно высокими значениями коэффициента поглощения выделяются тогда максимумами концентраций μ в твердой фазе. Если не учитывать описанных закономерностей, то часто это может создать впечатление наличия разных ореолов там, где в действительности имеется лишь один. Такой случай легко опознается, если формирование ореола еще не закончилось: тогда концентрации в жидкой фазе падают монотонно. Сравнивая $C_{ж}$ и $C_{т}$, можно получить в таких случаях интересные сведения о коэффициентах поглощения горных пород.

Если формирование ореола уже закончилось и он обнаруживается только в твердой фазе, то следует учитывать, что при образовании ореола от одного источника внутри каждого из внутренне однородных слоев среды концентрация падает в одном направлении. При нерезких границах между слоями такая интерпретация становится менее уверенной, так как может быть затруднительным различие падения $C_{т}$, связанного с увеличением расстояния от источника, и падения, вызванного постепенным изменением коэффициента поглощения.

Согласно сказанному выше, достаточно знать отрезок экспоненты, описывающей ореол на каком-либо участке, чтобы вычислить количество вещества μ , прошедшее этот участок. Это остается справедливым и в случае слоистых горных пород, что дает возможность оценивать размеры ореола по наблюдениям его части в одном из слоев.

Могут быть встречены ореолы промежуточного типа между описываемыми операторами с экспонентой и с функцией Гаусса. В частности, такой тип может быть встречен при следующих условиях.

Пусть V есть однородное пространство $x > 0$, ограниченное плоскостью $x=0$, на которой поддерживается постоянная концентрация $C_{ж} = C_{ож}$ (точнее: $C_{ж}(x)|_{x=0} = C_{ож} = \text{const}(t, y, z)$, причем $C_{т}(x)|_{x>0} = C_{ж}(x)|_{x>0} = 0$). Примем также $D|_{x>0} = \text{const}(t, x, y, z)$; $\kappa|_{x>0} = \text{const}(t, x, y, z)$. Тогда, согласно решению прямой задачи (см. § 3, гл. IV; Дубов, 1964₁), при $\kappa t = 0$ кривая $C_{ж}(x)$ имеет вид, соответствующий оператору переноса в виде функции Гаусса (диффузия без поглощения), а с увеличением κt постепенно переходит к экспоненциальному виду через промежуточные формы.

Палетки с теоретическими кривыми таких форм выборочно даны в наборе 3 атласа. Заметим, что даже при малых κT кривые C/C_0 в области, используемой для интерпретации, не очень сильно отличаются от экспонент. Поэтому пользоваться такими палетками приходится сравнительно редко.

Кривые $C_{т}(x)$ в таких случаях даже при сколь угодно малых κt отличаются от кривых концентраций в ореолах с оператором переноса в виде кривой Гаусса. Они сходятся к экспонентам даже несколько быстрее, чем кривые $C_{ж}(x)$.

Ореолы промежуточной формы образуются также при наложении разных процессов, в частности при гипергенном разрушении и диффузионном перемешивании материала коренных пород, в которых до разрушения имелись ореолы экспоненциального вида. Соотношение черт ореола каждого из двух описанных типов тогда определяется соотношением средних расстояний, пройденных частицами μ в процессе гипергенного разрушения коренных пород (а также в образовавшихся рых-

лых породах) и в процессе предварительного образования ореола в коренных породах.

2. В рассмотренных случаях среда, в которой образуются ореолы, была приближенно однородной или ступенчато-однородной. Но нередко требуется учесть непрерывные изменения свойств среды. Это можно сделать с помощью композиционного моделирования (гл. IV). В относительно простых случаях могут быть использованы и традиционные аналитические и численные методы. Здесь мы ограничимся лишь иллюстрацией решения обратной задачи на простейшем одномерном примере. Согласно решению прямой задачи (§ 2, 3, гл. IV), этот пример, несмотря на простоту, дает в некоторых случаях представление о практически важных явлениях, в частности об образовании рудных тел и первичных ореолов при фильтрационном подъеме рудообразующих растворов или диффузии μ из глубин, когда коэффициент поглощения κ растет по мере приближения к земной поверхности.

Пусть $A = \lambda$ в случае фильтрации и $A = \sqrt{\frac{\kappa}{D}}$ в случае диффузии, причем величина A меняется линейно в области $x > x_n$ (x_n — точка инверсии, при переходе через которую в сторону от малых x к большим начинается преимущественный переход μ из подвижной фазы в неподвижную):

$$A = Y(x - x_n), \quad (29)$$

где $Y = \frac{\partial A}{\partial x}$ — градиент величины A .

Согласно решению прямой задачи (§ 2, гл. IV), в случае фильтрации при больших UT выше точки инверсии (в области рудообразования) концентрации в твердой фазе подчиняются закону

$$C = \sqrt{e \cdot Y} \cdot C_s \cdot (x - x_n) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot Y \cdot (x - x_n)^2\right). \quad (30)$$

При больших κT и x , согласно решению прямой задачи (§ 3, гл. IV), формула (30) грубо приближенно справедлива и для диффузионной аномалии.

В наборе 4 атласа приведены теоретические кривые C/C_s , рассчитанные по формуле (30). После изложенного выше о палетках пользование этими кривыми, очевидно, не требует пояснений.

Имея достаточно большую часть графика C , с помощью этой палетки можно уточнить концентрации для различных $x > x_n$, в том числе положение и величину максимума. По подписям у кривых узнается \sqrt{Y} , откуда вычисляется Y — производная A по x/L , т. е. при измерении расстояний в единицах L . Точка x_n узнается как точка пересечения оси абсцисс практического графика C касательной к аппроксимирующей его теоретической кривой в ее крайней левой (нижней) точке.

На рис. 64 показаны результаты интерпретации ореолов молибдена и йода на одном из медно-молибденовых месторождений.

Узнав параметры Y и C_s , нетрудно найти линейную продуктивность аномалии выше точки инверсии: согласно формуле (30),

$$Q_l = \int_{x_n}^{\infty} C \cdot dx = \sqrt{eY} \cdot C_s. \quad (31)$$

Согласно упоминавшемуся решению прямой задачи, вместо (31) можно написать также выражения, содержащие генетически интересные параметры. В частности, при фильтрации

$$Q_l = \frac{\beta}{1 - \beta} \cdot \frac{G}{Y} \cdot T \cdot C_{иж},$$

где β — пористость зоны фильтрации (доля объема, занимаемая каналами); $G = \frac{\partial x}{\partial x}$; $C_{инк}$ — концентрация в подвижной фазе в точке инверсии. Зная часть из этих параметров и Q_i , можно оценить другие, неизвестные параметры.

Производя интегрирование величины C по той области пространства, где решение обратной задачи дает концентрации выше бортовых, получим оценку продуктивности (запасов) рудного тела.

Согласно формуле (30), можно оценить для соответствующих условий среднее расстояние, пройденное частицами μ после точки инверсии до поглощения:

$$\bar{R} = \frac{1}{Q_i} \int_{x_{ин}}^{\infty} (x - x_{ин}) \cdot C \cdot dx = \sqrt{\frac{\pi}{2 \cdot Y}} \quad (32)$$

Напомним, что на практике при интерпретации бывает удобнее пользоваться не концентрациями вдоль оси Ox , а линейными или площадными продуктивностями ореолов в сечениях, примерно перпендикулярных оси Ox . Это связано с тем, что в сечениях реальных зон диффузии и фильтрации распределение любых веществ и свойств не вполне однородно и содержит существенную случайную составляющую на одной линии (оси Ox). Усреднение по сечениям уменьшает эту составляющую, но оно затруднительно при часто встречающихся весьма нечетких границах зон: тогда неизвестно, по какому пространству следует вычислять среднюю концентрацию. Определение же величины продуктивности с использованием концентраций по сечению не требует обязательно четких границ зон: интеграл по кривой может быть взят и при постепенном, асимптотическом приближении ее к оси абсцисс.

С другой стороны, продуктивности пропорциональны средним концентрациям. Поэтому все описанные формулы, используемые для интерпретации геохимических аномалий в одномерном случае, останутся справедливыми, если в них по обе стороны от знаков равенств подставить соответствующие величины продуктивностей. Следовательно, и набор 4 теоретических кривых атласа можно применять при использовании не концентраций, а продуктивностей по сечениям, перпендикулярным оси Ox . Если фактически известны величины Q по сечениям, не перпендикулярным оси Ox , то должны использоваться соответствующие проекции.

Возможны случаи, когда исходной информации или предшествующих теоретических разработок недостаточно для полной количественной интерпретации разнообразных форм таких аномалий. Но и в этих случаях хотя бы часть полезной информации может быть извлечена. Например, согласно решению прямой задачи (§ 2, гл. IV), так называемая обратная зональность распределения химических элементов по глубине в некоторой области может свидетельст-

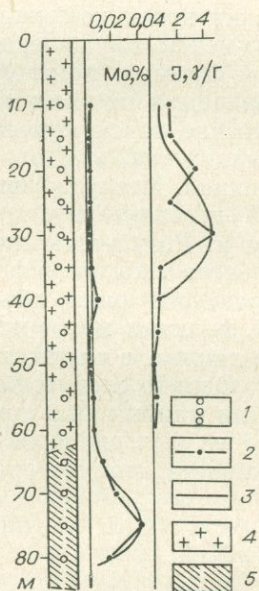


Рис. 64. Изменение концентраций молибдена и йода с глубиной (медно-молибденовое месторождение Каратас-IV, Центральный Казахстан; фактические данные М. А. Лаппа и Б. А. Судова).

1 — точки отбора проб; 2 — графики наблюдаемых концентраций; 3 — теоретические кривые C (для молибдена $C_{ф} = 0,00286\%$, $x_{и} = 81$ м, $Y = 0,0256$ м⁻²; для йода $C_{ф} = 0,029$ г/г, $x_{и} = 40,5$ м, $Y = 0,0092$ м⁻²); 4 — гранит без видимого оруденения; 5 — гранит с минералами молибдена и меди.

вывать о том, что эта область относится к нижней части зоны рудообразования.

Следует использовать и другие приближенные оценки. Например, при редкой сети отбора проб по максимальной наблюдаемой концентрации можно сделать заключение о нижней оценке для C_s , так как увеличение густоты сети отбора проб может привести к обнаружению еще больших концентраций и не может снизить эту оценку больше, чем на величину ошибки. Для величины же \bar{R}_i относительно легко получается верхняя оценка: если в некоторой точке отбора проб (x_1) обнаружена наибольшая концентрация, а в соседней (x_2) и более удаленных точках — во много раз меньшая, то можно полагать, что величина \bar{R}_i не превышает расстояния между x_1 и x_2 .

§ 3. КОМПЛЕКСНАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ АНОМАЛИИ

Изучая распределения различных веществ, мы можем получить различные, в том числе противоречивые, данные о наличии оруденения и его параметрах. В таком случае результаты интерпретации геохимических полей по каждому из элементов должны рассматриваться как аргументы той целевой функции, которая нас интересует: значениями этой функции могут быть оценки запасов руд определенного типа или ожидаемая прибыль в случае их дальнейшей разведки и добычи. Построение такой функции может производиться по алгоритмам аппроксимации так, как это описывалось в первой части для произвольных функций. Нетрудно видеть здесь и аналогию с построением карт удельной перспективности при использовании данных по многим веществам μ . Результаты интерпретации являются здесь формой предварительного сжатия информации (уменьшение объема числовых данных, характеризующих объект исследований). В качестве аргументов целевой функции могут использоваться не только геохимические, но и другие данные, в частности геофизические.

Однако следует заметить, что этот подход к комплексной интерпретации данных был предложен сравнительно недавно (Дубов, 1970₂) и еще не был опробован на практических примерах. Не исключена возможность, что его опробование поставит новые вопросы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теоретические положения, описанные в книге, обеспечивают возможность специфического подхода к геохимическим данным как к информации о некотором поле с оценкой точности наблюдений и изучением его параметров и физической сущности. При этом решаются актуальные задачи, вставшие перед геохимией к настоящему времени:

1. Количественные геохимические построения при определенной математической обработке данных могут широко применяться как при научных, так и при производственных работах, в том числе там, где выполняется экспрессный вещественный анализ проб.

2. Математическая фильтрация помех, разработанная с учетом особенностей геохимических полей (в частности, существенного отклонения статистического распределения шумов от нормального закона), обещает дать существенное удешевление и повышение эффективности научных и производственных геохимических исследований.

3. Фундаментальное понятие «геохимическая подвижность» приобретает четкий физический смысл, обозначая расстояния, проходимые в единицу времени атомами или другими частицами, несущими изучаемое вещество. Описанный метод позволяет находить количественную оценку этой величины по результатам обычных наблюдений.

4. Метод композиционного моделирования расширяет область применения математических моделей, включая сложные геохимические процессы, не поддающиеся традиционному математическому выражению.

5. Алгоритмы ранговой аппроксимации позволяют рассматривать обычную аппроксимацию и решение обратных задач как частные случаи единообразных, в принципе, операций. Эти алгоритмы дают возможность количественно оценить характеристики геохимических процессов и изучаемых или искомых объектов (в частности, рудных тел). С помощью алгоритмов ранговой аппроксимации можно повысить объективность заключений о генезисе изучаемых геохимических аномалий.

Приведенные примеры использования описанных положений в производственных организациях позволяют надеяться на эффективное дальнейшее применение этих положений на практике.

- Автоматические газоанализаторы.** Центральный институт научно-технической информации электротехнической промышленности и приборостроения. М., 1961.
- Бабко А. К., Пятницкий И. В.** Количественный анализ. М., «Высшая школа», 1968.
- Базаров И. П.** Термодинамика. М., Физматиздат, 1961.
- Бендат Дж.** Основы теории случайных шумов и ее применения. М., «Наука», 1965.
- Березин И. С., Жидков Н. П.** Методы вычислений. Т. 1, 2. М., Физматиздат, 1960.
- Богацкий В. В.** Математический анализ разведочной сети. М., Госгеолтехиздат, 1963.
- Богданов О. С., Поднек А. К. и др.** Вопросы теории и технологии флотации. — «Труды института механообр.», Л., 1959, вып. 124.
- Болтакс Б. И.** Диффузия в полупроводниках. М., Физматиздат, 1961.
- Большаков В. Д.** Теория ошибок наблюдений с основами теории вероятностей. М., «Недра», 1965.
- Большев Л. Н.** Преобразования случайных величин. — В кн: Математические заметки. Т. I. М., «Наука», 1967.
- Боровко Н. Н.** Обобщенный логнормальный закон распределения содержаний химических элементов в породах и рудах. — «Геохимия», 1964, № 3.
- Бронштейн И. Н., Семендяев К. А.** Справочник по математике. М., Гостехтеориздат, 1957.
- Вайнштейн Л. А., Зубаков В. Д.** Выделение сигналов на фоне случайных помех. М., «Советское радио», 1960.
- Вайнштейн Э. Е., Павленко Л. И.** Исследование влияния валового состава проб на результаты спектрального определения молибдена в гранитоидах. — Физический сборник, вып. 4(а). Изд. Львов. ун-та, 1958.
- Вальд А.** Последовательный анализ. М., Физматиздат, 1960.
- Великанов М. А.** Ошибки измерения и эмпирические зависимости. Л., Гидрометиздат, 1962.
- Вентцель Е. С.** Теория вероятностей. М., Физматиздат, 1962.
- Вернадский В. И.** Избр. соч. Т. I—IV. М., Изд-во АН СССР, 1954.
- Вистелиус А. Б.** Фосфор в гранитоидах Центрального Тянь-Шаня. — «Геохимия», 1962, № 2.
- Вистелиус А. Б.** Проблемы математической геологии (модели процессов и парагенетический анализ). — «Геол. и геофиз.», 1963₁, № 7.
- Вистелиус А. Б.** Проблемы математической геологии (случайный процесс). — «Геол. и геофиз.», 1963₂, № 12.
- Вопросы математической геологии.** Л., «Наука», 1968.
- Вычислительные методы и программирование.** Вып. VIII. Изд-во МГУ, 1967.
- Гаусс К. Ф.** Избр. геодезические соч. Т. 1. Способ наименьших квадратов. М., Изд-во геодезической литературы, 1957.
- Гельфандбейн Я. А.** Методы кибернетической диагностики динамических систем. Рига, «Зинатне», 1967.
- Геология и математика** (методологические, теоретические и организационные вопросы геологии, связанные с применением математических методов и ЭВМ). Новосибирск, «Наука», 1967.
- Гнеденко Б. В.** Курс теории вероятностей. М., «Наука», 1965.
- Годунов С. К., Прокопьев Г. П.** О решении дифференциальных уравнений с использованием криволинейных разностных сеток. — «Ж. вычислит. математики и математ. физики», 1968, Т. 8, № 1.
- Голубев В. С., Гарибянц А. А.** Гетерогенные процессы геохимической миграции. М., «Недра», 1968.
- Градштейн И. С., Рыжик И. М.** Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., Физматиздат, 1962.

Григорян С. В., Туманян В. З. К методике обнаружения и интерпретации геохимических аномалий.— В кн.: Научные основы геохимических методов поисков глубокозалегающих рудных месторождений. Иркутск, 1971.

Гутер Р. С., Овчинский Б. В. Элементы численного анализа и математической обработки результатов опыта. М., Физматгиздат, 1962.

Демашов В. С., Коршунов Ю. М. Анализ цифровых систем, содержащих сглаживающие фильтры.— В кн.: Методы отбора и преобразования информации. Киев, Изд-во АН УССР, 1967.

Демидович В. Б. Восстановление функции и ее производных по экспериментальной информации.— В кн.: Вычислительные методы и программирование. Вып. VIII. М., Изд-во МГУ, 1967.

Добрецов Н. Л., Маковская Н. С. Применение вероятностно-статистических методов в геологии (курс лекций для студентов НГУ). Новосибирск, 1967.

Долгов Ю. А. Об адиабатической мобилизации рудообразующих растворов.— «Геол. и геофиз.», 1965, № 8.

Дубов Р. И. Результаты опытно-методических металлометрических работ в Забайкалье.— В кн.: Материалы совещания геологов Восточной Сибири и Дальнего Востока по методике геологосъемочных и поисковых работ. Чита, 1956.

Дубов Р. И. Результаты опытных металлометрических работ в Забайкалье.— В кн.: Геохимические методы поисков рудных месторождений в СССР. (Труды Первого Всес. совещ. по геохимическим методам поисков рудных месторождений). М., 1957.

Дубов Р. И. Некоторые возможности повышения геологической эффективности геофизических работ в Восточном Забайкалье.— «Бюлл. Читинского геологического управления», 1958₁, № 4.

Дубов Р. И. К вопросу о применимости радиометрических методов при поисках месторождений цветных и редких металлов.— «Труды Читинского геологического управления», 1958₂, вып. 2.

Дубов Р. И. Радиометрические методы поисков.— В кн.: Руководство по комплексной методике поисков цветных и редких металлов в восточных районах страны. («Труды ВИТР», сб. 4). М., Госгеолтехиздат, 1961.

Дубов Р. И. Теоретический анализ распределения концентраций в фильтрационных ореолах.— В кн.: Сборник избранных лекций по геохимическим методам поисков рудных месторождений. Алма-Ата, изд. Казгеофизтреста, 1963.

Дубов Р. И. Теоретический анализ распределения концентраций в диффузионных ореолах.— В кн.: Сборник избранных лекций по геохимическим методам поисков рудных месторождений. Алма-Ата, изд. Казгеофизтреста, 1963₂.

Дубов Р. И. Теоретический анализ распределения концентраций в элювио-делювиальных ореолах.— В кн.: Сборник избранных лекций по геохимическим методам поисков рудных месторождений. Алма-Ата, изд. Казгеофизтреста, 1963₃.

Дубов Р. И. Вычисление погрешностей при геохимических исследованиях (статистическая обработка результатов вещественного анализа геохимических проб).— В кн.: Сборник избранных лекций по геохимическим методам поисков рудных месторождений. Алма-Ата, изд. Казгеофизтреста, 1963₄.

Дубов Р. И. Руководство к палеткам для интерпретации остаточных геохимических ореолов геологических тел простой формы. Алма-Ата, изд. Казгеофизтреста, 1963₅.

Дубов Р. И. К теории распределения концентраций в диффузионных геохимических ореолах.— В кн.: Геохимия рудных месторождений. М., «Наука», 1964.

Дубов Р. И. Концентрации химических элементов в ореолах рассеяния.— «Геол. и геофиз.», 1964₂, № 12.

Дубов Р. И. Особенности математической обработки результатов эксперимента и выбор оптимального метода вещественного анализа при широком диапазоне измеряемых величин.— В кн.: Тезисы докладов Первого Всесоюзного совещания по планированию эксперимента. М., изд. Московск. энергетич. ин-та, 1964₃.

Дубов Р. И. Количественная оценка перспективности районов по данным геохимического опробования.— «Бюлл. науч.-техн. информации», 1965, № 63.

Дубов Р. И. Природа фильтрационного эффекта.— «Изв. АН СССР. Сер. геол.», 1966₁, № 3.

Дубов Р. И. Оценка размеров геохимических ореолов и подвижности химических элементов.— В кн.: Математические методы геохимических исследований. М., «Наука», 1966₂.

Дубов Р. И. Математическая обработка результатов биогеохимических исследований.— В кн.: Микроэлементы в сельском хозяйстве и медицине (Тезисы докл. V Всес. совещ. Т. 1). Улан-Удэ, Бурятское кн. изд-во, 1966₃.

Дубов Р. И. К вопросу об основных характеристиках точности спектрального анализа геохимических проб.— В кн.: Спектральный анализ в геологии и геохимии (Материалы Второго Сибирского совещания по спектроскопии). М., «Наука», 1967₁.

Дубов Р. И. Способ математического моделирования сложных геологических процессов.— В кн.: Второе Сибирское совещание по применению математических методов и ЭВМ в геологии и геофизике. Новосибирск, 1967₂.

Дубов Р. И. О выборе оптимального метода и контроле измерений.— В кн.: Материалы Второй Всесоюзной конференции по планированию эксперимента. М., изд. Московск. энергетич. ин-та, 1968₁.

Дубов Р. И. Смещение средних оценок при геохимических и металлогенических исследованиях.— В кн.: Применение математических методов в геологии (Материалы научной конференции). Алма-Ата, 1968₂.

Дубов Р. И. Физико-математический анализ гипергенного поля рассеяния.— В кн.: Литохимические поиски рудных месторождений по их гипергенным ореолам и потокам рассеяния (Материалы к I тематической сессии Межведомственного Совета по проблеме «Научные основы геохимических методов поисков месторождений полезных ископаемых»). Алма-Ата, 1968₃.

Дубов Р. И. Влияние дискретности записей при экспрессном спектральном анализе геохимических проб.— «Развед. и охр. недр.», 1969₁, № 1.

Дубов Р. И. Количественные исследования геохимических полей.— Ежегодник 1968 (Сибирский институт геохимии). Иркутск, 1969₂.

Дубов Р. И. Количественные исследования геохимических полей для поисков рудных месторождений. Доктор. дисс. Иркутск, 1969₃.

Дубов Р. И. Поправка на усреднение.— В кн.: Ежегодник 1969 (Сибирский институт геохимии). Иркутск, 1970₁.

Дубов Р. И. Обобщенная регрессия и возможности ее применения для комплексной интерпретации данных.— В кн.: Ежегодник 1969 (Сибирский институт геохимии). Иркутск, 1970₂.

Дубов Р. И. О размерах ореолов месторождений.— В кн.: Ореолы рассеяния месторождений Восточной Сибири. М., «Наука», 1971₁.

Дубов Р. И. К применению математических методов при геохимическом картировании и поисках рудных месторождений.— В кн.: Ореолы рассеяния месторождений Восточной Сибири. М., «Наука», 1971₂.

Дубов Р. И. О методах физико-математического моделирования геохимических процессов.— В кн.: Кинетика и динамика геохимических процессов (Труды I семинара по кинетике и динамике геохимических процессов). М., изд. ВИМС, 1971₃.

Дубов Р. И., Бугров Н. М., Гладких В. А. Возможности применения радиометрии при поисках некоторых типов месторождений редких и цветных металлов.— В кн.: Новое в методике и технике геологоразведочных работ (Труды ВИТР), сб. 2. Л., 1959.

Дубов Р. И., Верглиб А. Б. Численное решение некоторого класса задач математической физики методом расщепления физических причин.— Информационный сборник трудов вычислительного центра Иркутск. ун-та, вып. 1. Иркутск, 1966.

Дубов Р. И., Квятковский Е. М. К вопросу о спектральном анализе металлометрических проб на вольфрам.— «Изв. вузов. Сер. геол. и развед.», 1959, № 2.

Дубов Р. И., Квятковский Е. М. Распределение вольфрама во вторичных ореолах рассеяния.— «Зап. Ленинград. горного ин-та», т. XXXIX, вып. 2. М., Госгортехиздат, 1961.

Дубов Р. И., Найгебауэр В. А., Соловьева Л. В. Характерные черты геохимических ореолов на одном из месторождений вольфрама.— В кн.: Математические методы геохимических исследований. М., «Наука», 1966.

Дубов Р. И., Фурсов В. З. Соотношение между параметрами статистического распределения химических элементов в коренных горных породах и мелкой фракции элювия — делювия.— В кн.: Математические методы геохимических исследований. М., «Наука», 1966.

Дьяконов Е. Г. Разностные схемы с расщепляющимся оператором для систем уравнений вида $L_0 \frac{\partial u}{\partial t} + L_1 u = f$. — «ДАН СССР», 1967, т. 176, № 2.

Езекиэл Мордэкей, Фокс Карл А. Методы анализа корреляций и регрессий линейных и криволинейных. М., «Статистика», 1966.

Жариков В. А., Дюжикова Т. Н., Максакова Э. М. О фильтрационном эффекте в растворах электролитов.— «Изв. АН СССР. Сер. геол.», 1963, № 10.

Зайт В. Диффузия в металлах. М., ИЛ, 1958.

Зенков Д. А. Четыре типа изменчивости рудных тел.— «Развед. и охр. недр.», 1955, № 6.

Иванов В. К. Интегральные уравнения I рода и приближенное решение обратной задачи теории потенциала.— «ДАН СССР», 1962, 142, № 5.

Инструкция по геохимическим методам поисков рудных месторождений. М., «Недра», 1965.

Инструкция по электроразведке. Ч. 1. (Методы постоянного тока, естественного поля и теллурических токов.) М. Госгеолтехиздат, 1961.

Каллистов П. Л. Изменчивость оруденения и плотность наблюдений при разведке и опробовании.— «Сов. геология», 1956, сб. 53.

Канцель А. З. Функция распределения металла в рудах как генетическая характеристика процесса рудообразования.— «Изв. АН СССР. Сер. геол.», 1966, № 10.

Квятковский Е. М. Полевая точность геофизических наблюдений.— «Зап. Ленинград. горного ин-та», 1951, т. XXVI, вып. II.

Квятковский Е. М. Оценка точности полуколичественного спектрального анализа по шкале вероятностей.— «Зап. Ленинград. горного ин-та», 1966, т. L, вып. 2.

Кендалл М. Дж., Стьюарт А. Теория распределений. М., «Наука», 1966.

Колмогоров А. Н. О логарифмически-нормальном законе распределения размеров частиц при дроблении.— «ДАН СССР», 1941, т. XXXI, № 2.

- Колмогоров А. Н. Интерполирование и экстраполирование стационарных случайных последовательностей.— «Изв. АН СССР», 1941, вып. 1.
- Колмогоров А. Н. Определение центра рассеивания и меры точности по ограниченному числу наблюдений.— «Изв. АН СССР. Сер. матем.», 1942, т. 6.
- Комри Л. Дж. Шестизначные математические таблицы Чомберса. М., «Наука», 1964.
- Кондратьев В. Н. Кинетика химических газовых реакций. М., Изд-во АН СССР, 1958.
- Коржинский Д. С. Фильтрационный эффект и его значение для геологии.— «Изв. АН СССР. Сер. геол.», 1947, № 2.
- Коржинский Д. С. Открытые системы с вполне подвижными компонентами и правило фаз.— «Изв. АН СССР. Сер. геол.», 1949, № 2.
- Коржинский Д. С. Различие инфильтрационной и диффузионной метасоматической зональности в отношении минералов переменного состава.— «ДАН СССР», 1952, т. 86, № 3.
- Коржинский Д. С. К вопросу о выводе уравнений инфильтрационной и диффузионной метасоматической зональности.— «ДАН СССР», 1953, т. 88, № 3.
- Косыгин М. К., Росляков Г. В. и др. Опыт применения множественной корреляции для решения некоторых задач поисков и разведки.— «Изв. вузов. Сер. геол. и развед.», 1966, № 9.
- Крицук И. Н., Квятковский Е. М. Распределение металлов в различных классах и фракциях делювиальных ореолов месторождений Восточного Забайкалья.— «Зап. Ленинград. горного ин-та», 1966, т. L, вып. 2.
- Кубачек Л. Оценка точности измерения при экспериментальных методах.— «Измерит. техн.», 1965, № 3.
- Лаврентьев М. М. О некоторых некорректных задачах математической физики. Новосибирск, Изд-во СО АН СССР, 1962.
- Лаврентьев М. М. Об одном классе обратных задач для дифференциальных уравнений.— «ДАН СССР», 1965, т. 160, № 1.
- Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. V. (Статистическая физика.) М., «Наука», 1964.
- Ланцош К. Практические методы прикладного анализа. М., Физматгиз, 1961.
- Лапухов А. С. О диффузионном переносе вещества в трещинных полостях и сквозь межзерновое пространство водонасыщенных горных пород.— «Геол. и геофиз.», 1966, № 12.
- Левич В. Г. Физико-химическая гидродинамика. М., Гос. изд-во физ.-мат. литературы, 1959.
- Линник Ю. В. Метод наименьших квадратов и основы теории обработки наблюдений. М., Физматиздат, 1962.
- Линник Ю. В., Хусу А. П. Некоторые соображения по поводу статистического анализа неровностей шлифованного профиля.— В кн.: Взаимозаменяемость, точность и методы измерения в машиностроении. Кн. 47. М., Машигиз, 1958.
- Лончих С. В., Мешалкин Л. Д. Об оценке результатов полуколичественного спектрального анализа.— «Завод. лабор.», 1964, № 7.
- Лукомский Я. И. Теория корреляции и ее применения к анализу производства. М., Госстатиздат, 1961.
- Лыков А. В. Теория теплопроводности. М., «Высшая школа», 1967.
- Магницкий В. А. Внутреннее строение и физика Земли. М., «Недра», 1965.
- Маликов М. Ф. Основы метрологии. Ч. I. (Учение об измерении.). М., Изд-во «Правда», 1949.
- Маликов С. Ф., Тюрин Н. И. Введение в метрологию. М., Изд-во стандартов, 1966.
- Матерон Ж. Основы прикладной геостатистики. М., «Мир», 1968.
- Мешалкин Л. Д. Выбор шкалы для представления результатов полуколичественного спектрального анализа.— «Завод. лабор.», 1964, № 7.
- Миллер Р. Л., Кан Дж. С. Статистический анализ в геологических науках. М., «Мир», 1965.
- Михлин С. Г. Численная реализация вариационных методов. М., «Наука», 1966.
- Мищенко В. С. К распределению ошибок приближенных методом спектрального анализа.— «Завод. лабор.», 1965, № 3.
- Моррис Х. Т., Ловеринг Т. С. Гипергенное и гидротермальное рассеяние тяжелых металлов в боковых породах близ рудных тел в районе Тинтик, Юта.— В кн.: Геохимические методы поисков рудных месторождений. М., ИЛ, 1954.
- Найгебауэр В. А. Соотношение средних концентраций химических элементов в коренных породах и элювии — делювии.— В кн.: Тезисы докладов 5 геологической конференции «Геология и полезные ископаемые Забайкалья». Чита, Забайкальский филиал геогр. об-ва СССР, 1966.
- Налимов В. В. Применение математической статистики при анализе вещества. М., Физматиздат, 1960.
- Овчинников Л. Н., Григорян С. В. Закономерности состава и строения первичных геохимических ореолов сульфидных месторождений.— В кн.: Научные основы геохимических методов поисков глубокозалегающих рудных месторождений. Иркутск, 1970.
- Овчинников Л. Н., Максенков В. Г. Экспериментальное исследование фильтрационного эффекта в растворах.— «Изв. АН СССР. Сер. геол.», 1949, № 3.

- Панчиков Г. М., Лебедев В. П. Химическая кинетика и катализ. М., Изд-во МГУ, 1962.
- Перельман А. И. Очерки геохимии ландшафта. М., Изд-во геогр. литературы, 1955.
- Перельман А. И. Геохимия эпигенетических процессов (зона гипергенеза). М., «Недра», 1968.
- Плющ А. М. О прогнозе температуры в недрах.— «ДАН СССР», 1967, т. 172, № 2.
- Поликарпочкин В. В. Распределение концентраций рудообразующих элементов на склонах при самопроизвольном движении рыхлых масс и действии склоновых водных потоков.— В кн.: Математические методы геохимических исследований. М., «Наука», 1966.
- Поспелов Г. Л. Геологические предпосылки к физике рудоконтролирующих флюидопроводников.— «Геол. и геофиз.», 1963, № 3, 4.
- Поспелов Г. Л. К физике рудоконтролирующих флюидопроводников.— «Геол. и геофиз.», 1964, № 11, 12.
- Поспелов Г. Л., Каушанская П. И. Деформации горных пород, вызванные развитием в них кристаллов, при встречной диффузии реагентов (экспериментальные данные).— «Геол. и геофиз.», 1965, № 5.
- Прокофьев В. К. Фотографические методы количественного спектрального анализа металлов и сплавов. Ч. II. (Методика.) М.— Л., Гостехтеориздат, 1951.
- Пугачев В. С. Теория случайных функций. М., Физматиздат, 1962.
- Путиков О. Ф. Распределение концентраций в геохимических ореолах.— «Изв. АН СССР. Физика Земли», 1969, № 4.
- Разумовский Н. К. О распределении концентраций металлов в рудных месторождениях.— «ДАН СССР», 1940, т. 28, № 9.
- Разумовский Н. К. Логарифмически-нормальный закон распределения вещества и его свойства.— «Зап. Ленинград. горного ин-та», 1948, т. XX.
- Резников Б. А. К теории многомерной последовательной фильтрации.— В кн.: Анализ и синтез систем автоматического управления. М., «Наука», 1968.
- Родионов Д. А. К вопросу о логарифмически-нормальном распределении содержащий элементов в изверженных горных породах.— «Геохимия», 1961, № 4.
- Родионов Д. А. Функция распределения содержаний элементов и минералов в изверженных горных породах. М., «Наука», 1964.
- Родионов Д. А. Статистические методы разграничения геологических объектов по комплексу признаков. М., «Недра», 1968.
- Романенко А. Ф., Сергеев Г. А. Вопросы прикладного анализа случайных процессов. М., «Советское радио», 1968.
- Романовский В. И. Основные задачи теории ошибок. М., Гостехиздат, 1947.
- Рыжов П. А., Гудков В. М. Применение математической статистики при разведке недр. М., «Недра», 1966.
- Рябов Ю. А. Дифференциальные уравнения теплопроводности. М., изд. Всес. заоч. энергетич. ин-та, 1957.
- Савинский И. Д. Таблицы вероятностей пересечения эллиптических объектов прямоугольной сетью наблюдений. М., «Недра», 1964.
- Сарманов О. В., Вистелиус А. Б. О корреляции между процентными величинами.— «ДАН СССР», 1959, т. 126, № 1.
- Сафронов Н. И. К вопросу об ореолах рассеяния месторождений полезных ископаемых и их использование при поисках и разведке.— «Проблемы сов. геологии», 1936, т. VI, № 4.
- Сафронов Н. И. Основы геохимических методов поисков рудных месторождений (методическое руководство). Л., ОНТИ ВИТР, 1967.
- Сафронов Н. И., Сафронов Д. Н. О вероятных закономерностях распределения запасов металлов в земной коре.— «Методика и техника разведки», сб. № 44. Л., ВИТР, 1964.
- Сафронов Н. И., Соловов А. П., Сергеев Е. А. Новые геофизические методы поисков и разведки полезных ископаемых, основанные на изучении ореолов рассеяния. М.— Л., ЦНИГРИ ГГУ НКТП СССР, 1937.
- Сегалович В. И. Выделение слабых гравитационных аномалий при поисках глубинных рудных месторождений.— «Развед. и охр. недр.», 1965, № 4.
- Семенова О. Г. О минимальных размерах выборок и площадей при вероятностной оценке эффективности поисковой сети.— «Геол. и геофиз.», 1966, № 11.
- Сергеев Е. А. Исследование вод как средство поисков полиметаллических месторождений.— «Разведка недр», 1946, № 2.
- Смирнов В. И. Курс высшей математики. Т. I, II. М., Гостехтеориздат, 1957.
- Смирнов С. И. Вероятностно-статистическая оценка геохимического фона при поисках месторождений полезных ископаемых.— «Геохимия», 1963, № 3.
- Смирнов Н. В., Дунин-Барковский И. В. Курс теории вероятностей и математической статистики для технических приложений. М., «Наука», 1965.
- Соловов А. П. К вопросу об оценке перспективности орудения по результатам металлометрической съемки.— «Разведка недр.», 1952, № 4.
- Соловов А. П. Основы теории и практики металлометрических съемок. Алма-Ата, Изд-во АН КазССР, 1959.

- Соловов А. П. Спектральный анализ при геохимических съемках.— «Развед. и охр. недр.», 1965, № 8.
- Соловов А. П. Параметры первичного ореола эндогенного месторождения.— «Геол. рудн. месторожд.», 1966, № 3.
- Соловов А. П., Кунин Н. Я. Металлометрическая съемка по потокам рассеяния в горных районах.— «Сов. геология», 1960, № 5.
- Тасон Л. В., Дубов Р. И., Козлов В. Д., Кузьмин М. И. Геохимическое значение дисперсии концентраций редких элементов в гранитоидах.— В кн.: Вопросы геохимии изверженных горных пород и рудных месторождений Восточной Сибири. М., «Наука», 1965.
- Телеснин Р. В. Молекулярная физика. М., «Высшая школа», 1965.
- Техническая инструкция по магнитной разведке. М., Госгеолтехиздат, 1963.
- Тихонов А. Н. О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации.— «ДАН СССР», 1963, т. 151, № 3.
- Тихонов А. Н. О регуляризации некорректно поставленных задач.— «ДАН СССР», 1963, т. 153, № 1.
- Тихонов А. Н. О некорректно поставленных задачах.— В кн.: Вычислительные методы и программирование. Вып. VIII. М., Изд-во МГУ, 1967.
- Тихонов А. Н. О методах решения некорректно поставленных задач.— В кн.: Труды международного конгресса математиков. М., «Мир», 1968.
- Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. и др. К вопросу об обработке спектров квантов и быстрых нейтронов, измеренных с помощью однокристалльных спектров.— «Изв. АН СССР. Сер. физ.», 1965, т. XXIX, № 5.
- Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М., «Наука», 1966.
- Толстой М. И., Остафийчук И. М., Гудименко Л. М. К вопросу о типе кривых статистического распределения химических элементов в горных породах и рудах и способах расчета их параметров.— «Геохимия», 1965, № 11.
- Треппел В. Хемосорбция. М., ИЛ, 1958.
- Турчин В. Ф. Решение уравнения Фредгольма I рода в статистическом ансамбле гладких функций.— «Ж. вычислит. математики и математ. физики», 1967, т. 7, № 6.
- Турчин В. Ф. Выбор ансамбля гладких функций при решении обратной задачи.— «Ж. вычислит. математики и математ. физики», 1968, т. 8, № 1.
- Урусов В. С. О нормальном и логнормальном распределении случайной ошибки в количественном спектральном анализе.— «Ж. аналит. химии», 1961, т. XVI, вып. 4.
- Фор Р., Кофман А., Дени-Папен. Современная математика. М., «Мир», 1966.
- Хальд А. Математическая статистика с техническими приложениями. М., ИЛ, 1956.
- Хелгесон Г. К. Комплексообразование в гидротермальных растворах. М., «Мир», 1967.
- Хемминг Р. В. Численные методы. М., «Наука», 1968.
- Худсон Д. Статистика для физиков. (Лекции по теории вероятностей и элементарной статистике.) М., «Мир», 1967.
- Четвериков Л. И. Теоретические основы моделирования тел твердых полезных ископаемых. Изд. Воронежск. ун-та, 1968.
- Шестаков Ю. Г. Геохимический показатель зон магнетитового оруденения.— «Сов. геология», 1965, № 3.
- Шиманский А. А., Базанов Г. А. О возможности использования распределения Вейбулла при решении геохимических задач.— В кн.: Математические методы геохимических исследований. М., «Наука», 1966.
- Шиханович Ю. А. Введение в современную математику. М., «Наука», 1965.
- Штернберг А. А. Состояние воды в надкритической области в связи с проблемами глубинного минералообразования.— «Геол. рудн. месторожд.», 1962, № 5.
- ЩигOLEV Б. М. Математическая обработка наблюдений. М., Физматиздат, 1962.
- Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск, «Наука», 1967.
- Янишевский Е. М., Григорян С. В. и др. Эндогенные ореолы рассеяния некоторых гидротермальных месторождений. М., Госгеолтехиздат, 1963.
- Яноши Л. Теория и практика обработки результатов измерений. М., «Мир», 1968.
- Ястремский Б. С. Некоторые вопросы математической статистики. М., Госстатиздат, 1967.
- Яцимирский К. В. Кинетические методы анализа. М., Госхимиздат, 1963.
- Ahrens L. H. Quantitative spectrochemical analysis of silicates. London, 1955.
- Aitchison J., Brown J. A. C. The lognormal distribution. Cambridge University press, 1957.
- Grassman H. Die Standardgesteinsproben des ZGI.— «Z. angew. Geol.», 1966, B. 12, H. 7.
- Fairweather G., Gourlay A. R., Mitchell A. R. Some high accuracy difference schemes with a splitting operator for equations of parabolic and elliptic type.— «Numer. Math.», 1967, v. 10, N 1.
- Johnson N. L. «Biometrika», 1949, v. 36.
- Jost W. Diffusion in solids, liquids and gases. New York, Acad. Press, 1952.
- Kaptaan J. C., van Uven M. J. Skew frequency curves. 1916.

- Kendall M. G.** The advanced theory of statistics. V. 1, 2. London, 1948.
- Krumbein W. C.** Regional and local components in facies maps.—“Amer. Assoc. Petrol. Geol. Bull.”, 1956, v. 40, N 8.
- Miller K. L.** Trend surface: their application to analysis and description of environments of sedimentation.—“J. Geol.”, 1956, v. 64, N 5.
- Nackowski M. P., Charles A. Mardirosian and Joseph M. Botbol.** Trend surface analysis of trace chemical data, Park City district, Utah.—“Econ. Geol.”, 1967, v. 62.
- Poleck H.** Anwendungen der Statistik in der praktischen Messtechnik.—“Z. Instrumentenkunde”, 1967, B. 75, N 5.
- Uven M. J. van.** Logarithmic frequency distributions.—“Kon. Acad. v. Wetenschappen”, 1917, v. 19.
- Vistelius A. B.** The skew frequency distributions and the fundamental law of the geochemical processes.—“J. Geol.”, 1960, v. 68, N 1.
- Wagner F. R. van.** Reliable decisions from unreliable measurements —“Electron. Engr.”, 1967, v. 26, N 4.
- Wiener N.** Extrapolation, interpolation and smoothing of stationary time series. New York, J. Wiley, 1949.

Приложение

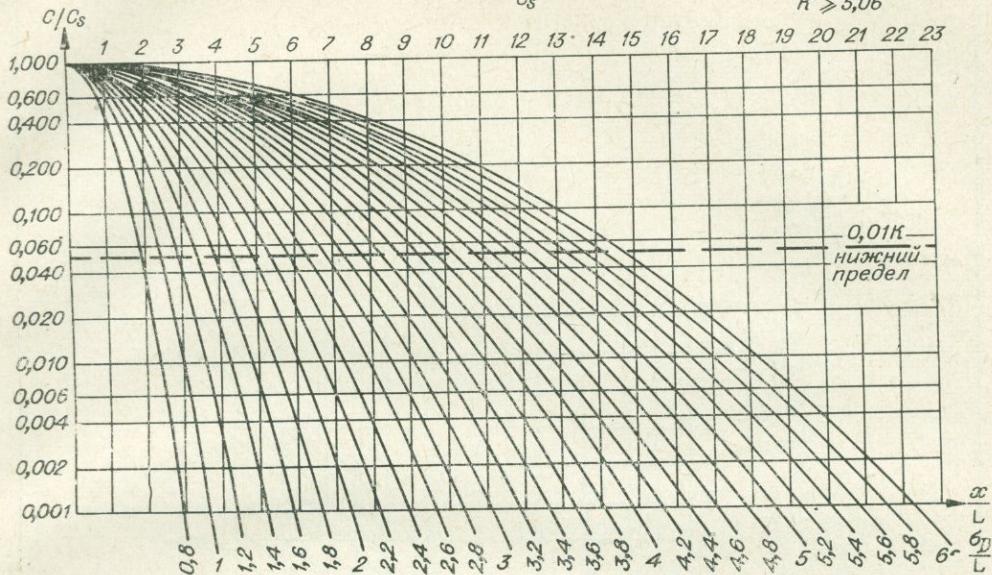
АТЛАС
ТЕОРЕТИЧЕСКИХ
КРИВЫХ C/C_s

1. ДИФФУЗИОННОЕ РАССЕЯНИЕ
ПЛАСТООБРАЗНОГО ТЕЛА
ПРИ $D = \text{const}$, $\kappa = 0$

$$\frac{c}{c_s} = e^{-\frac{x^2}{2\sigma_D^2}}$$

$$\frac{p}{\sigma_D} \leq 0,25$$

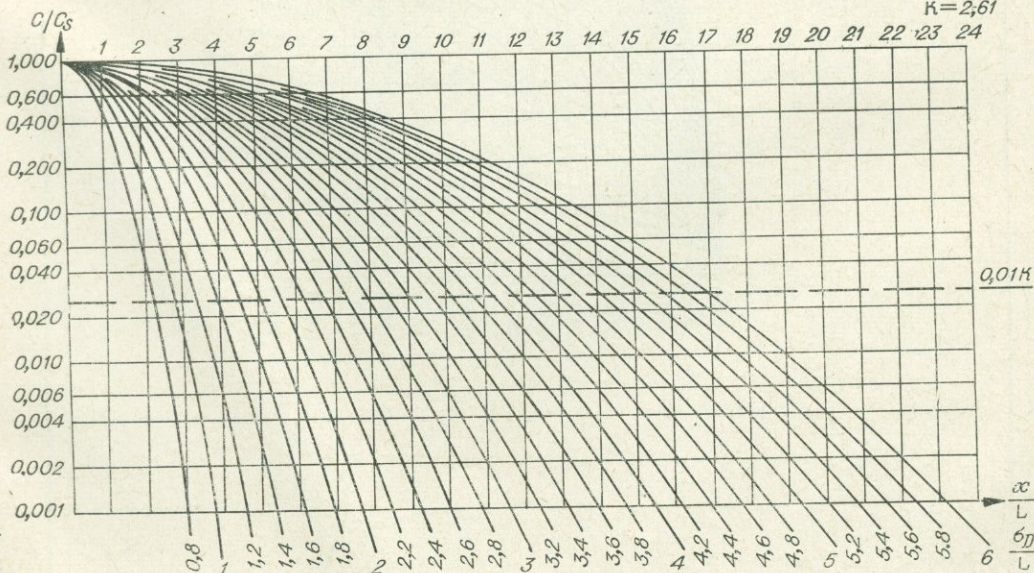
$$K \geq 5,06$$



$$\frac{c}{c_s} = \frac{1}{2\Phi\left(\frac{p}{\sigma_D}\right)} \left[\Phi\left(\frac{p+x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p-x}{\sigma_D}\right) \right]$$

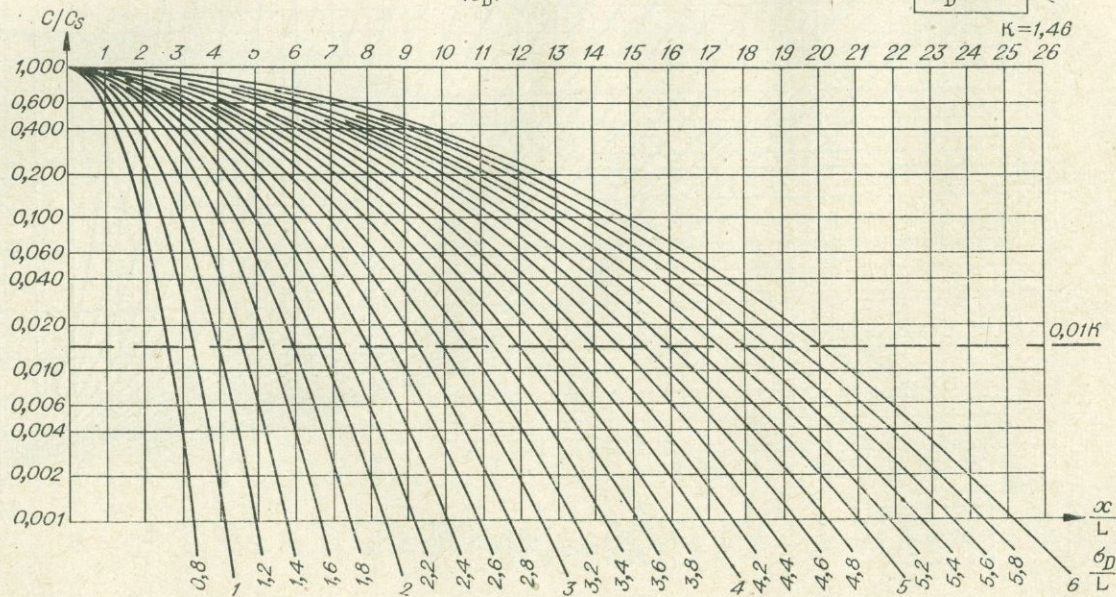
$$\frac{p}{\sigma_D} = 0,5$$

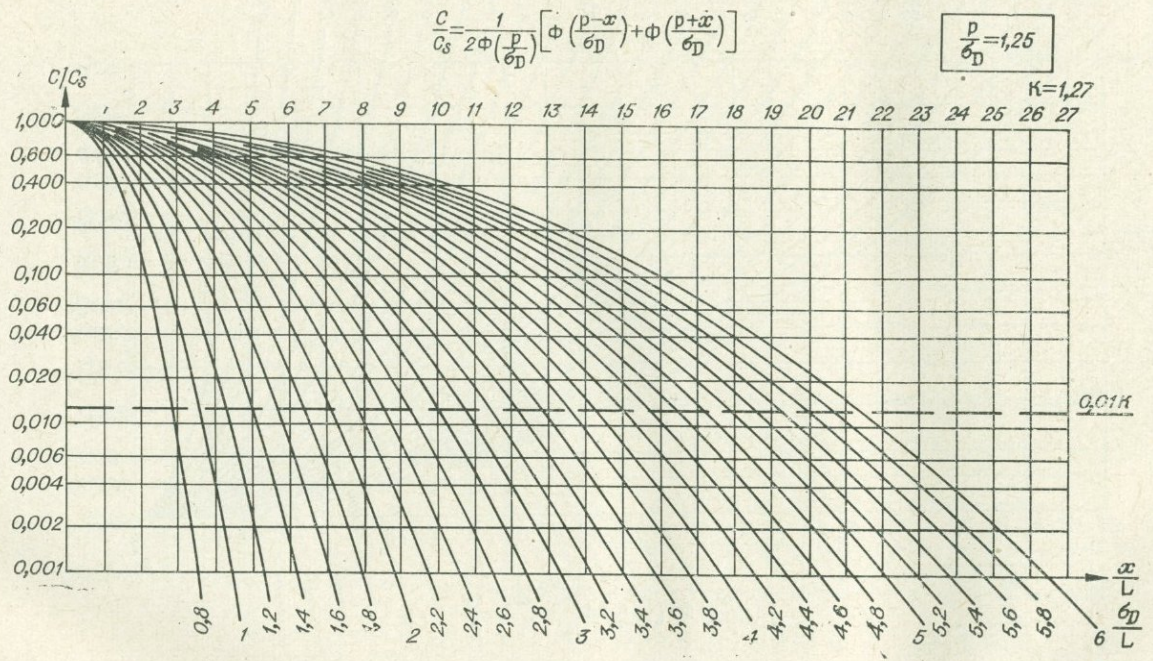
$$K = 2,61$$



$$\frac{c}{c_s} = \frac{1}{2\Phi\left(\frac{p}{\sigma_D}\right)} \left[\Phi\left(\frac{p-x}{\sigma_D}\right) + \Phi\left(\frac{p+x}{\sigma_D}\right) \right]$$

$$\frac{p}{\sigma_D} = 1,0$$

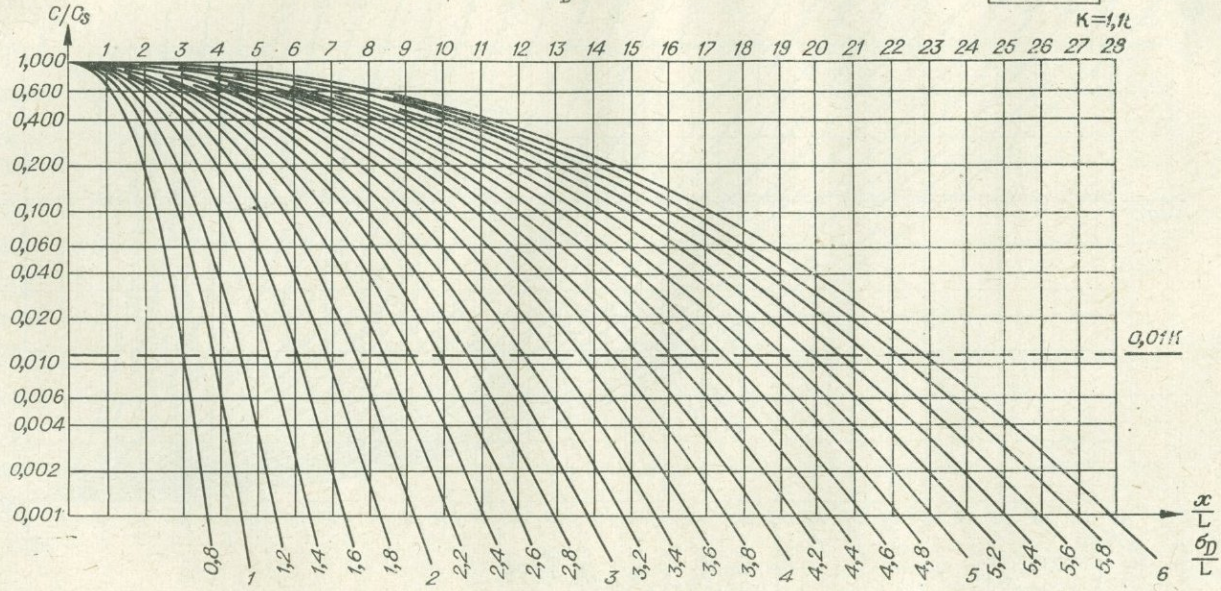
 $\kappa = 1,46$




$$\frac{c}{c_s} = \frac{1}{2\phi\left(\frac{p}{\sigma_D}\right)} \left[\phi\left(\frac{p-x}{\sigma_D}\right) + \phi\left(\frac{p+x}{\sigma_D}\right) \right]$$

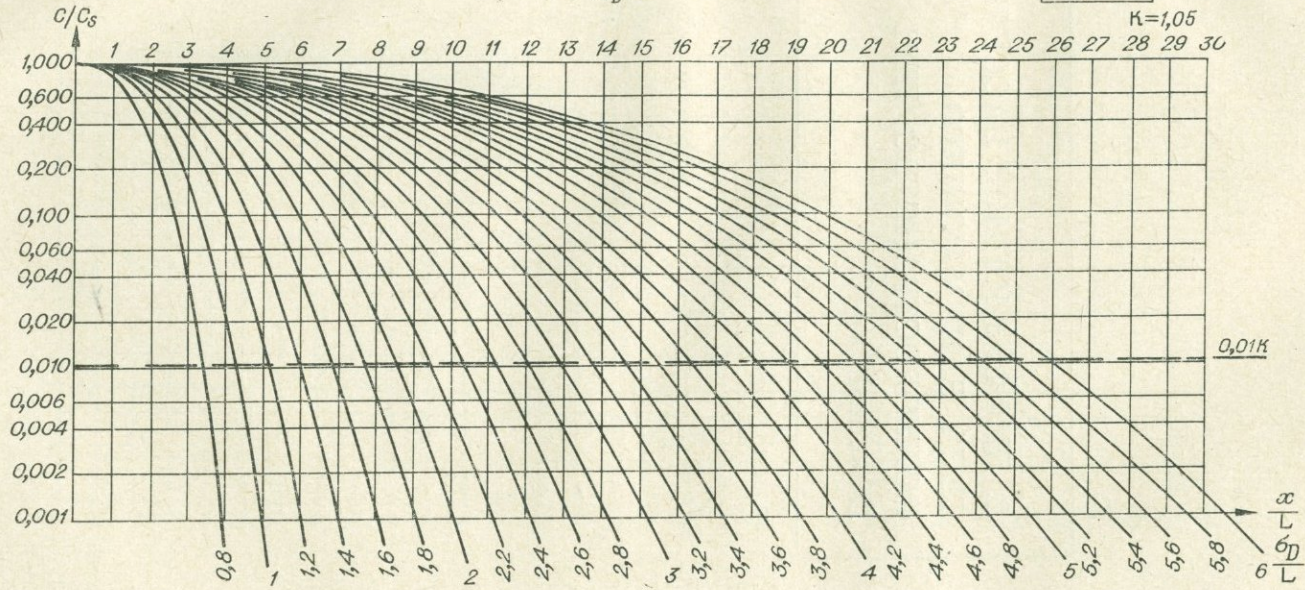
$$\frac{p}{\sigma_D} = 1,5$$

$K=1,1$

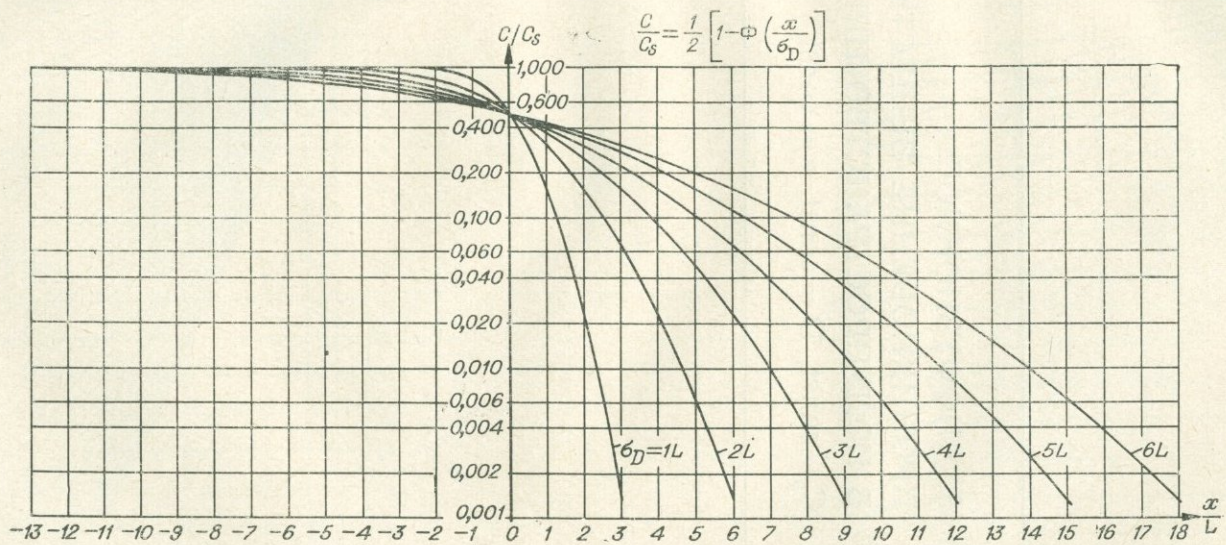


$$\frac{c}{c_s} = \frac{1}{2\phi\left(\frac{p}{\delta_D}\right)} \left[\phi\left(\frac{p-x}{\delta_D}\right) + \phi\left(\frac{p+x}{\delta_D}\right) \right]$$

$$\frac{p}{\delta_D} = 2,0$$

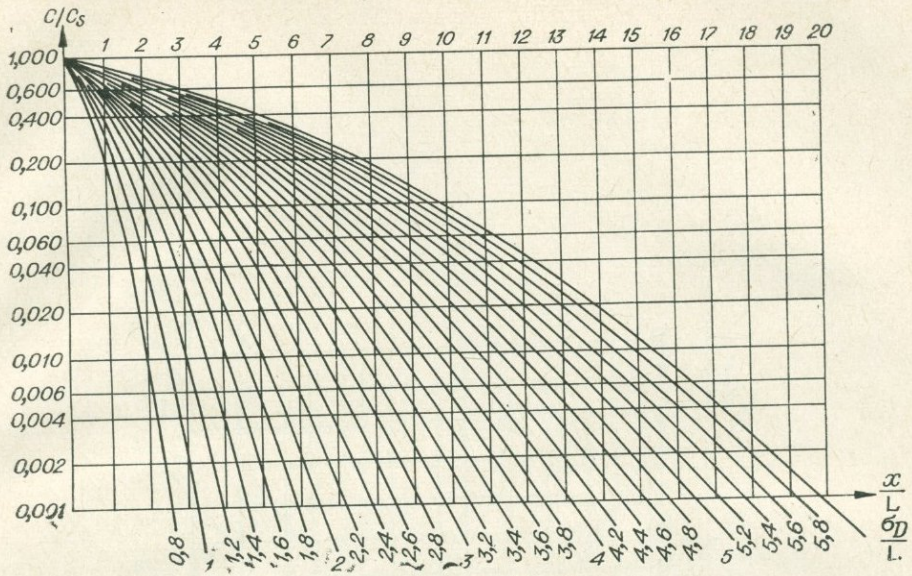
 $K = 1,05$


2. ДИФФУЗИОННОЕ РАССЕЙЯНИЕ
ТЕЛА, ЗАНИМАЮЩЕГО
ПОЛУПРОСТРАНСТВО, ПРИ
 $D = \text{const}, \kappa = 0$

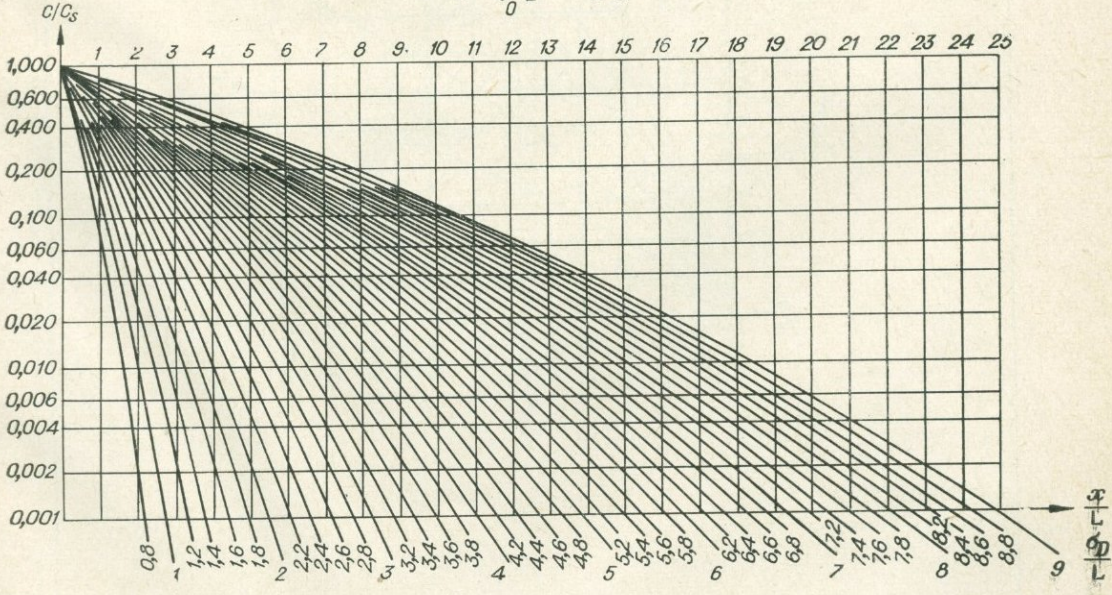


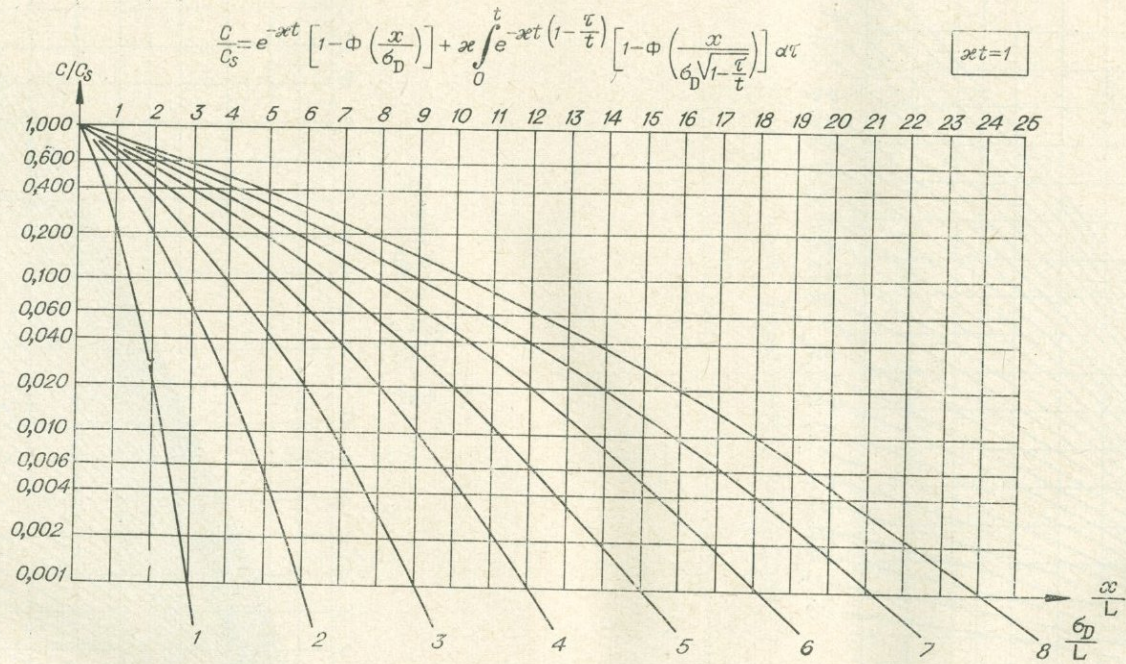
3. ДИФФУЗИОННОЕ
ПРОНИКНОВЕНИЕ ВЕЩЕСТВА
В ПОЛУПРОСТРАНСТВО ПРИ
 $C_0 = \text{const}$, $D = \text{const}$, $\kappa = \text{const}$

$$\frac{c}{c_s} = 1 - \Phi\left(\frac{x}{\sigma_D}\right)$$

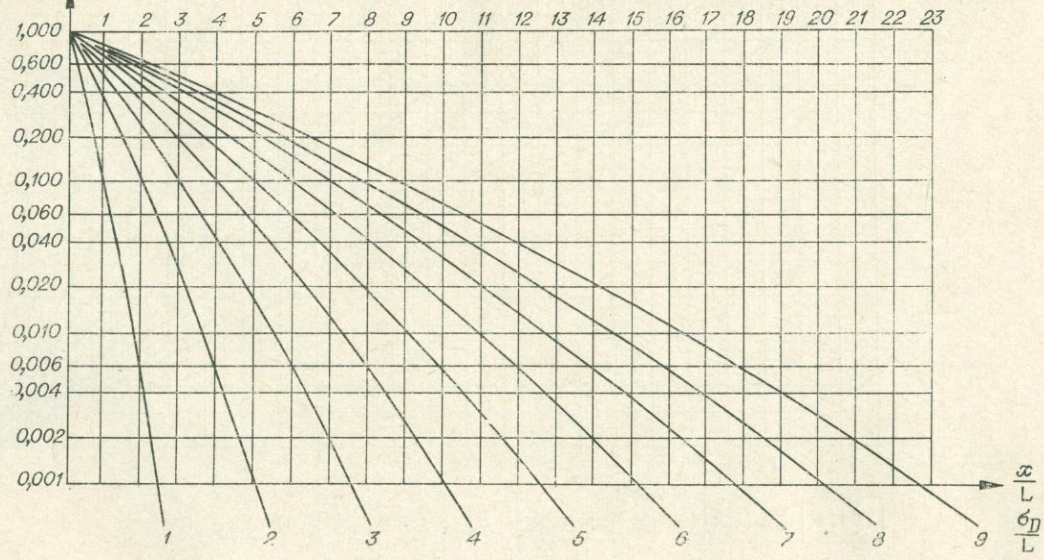


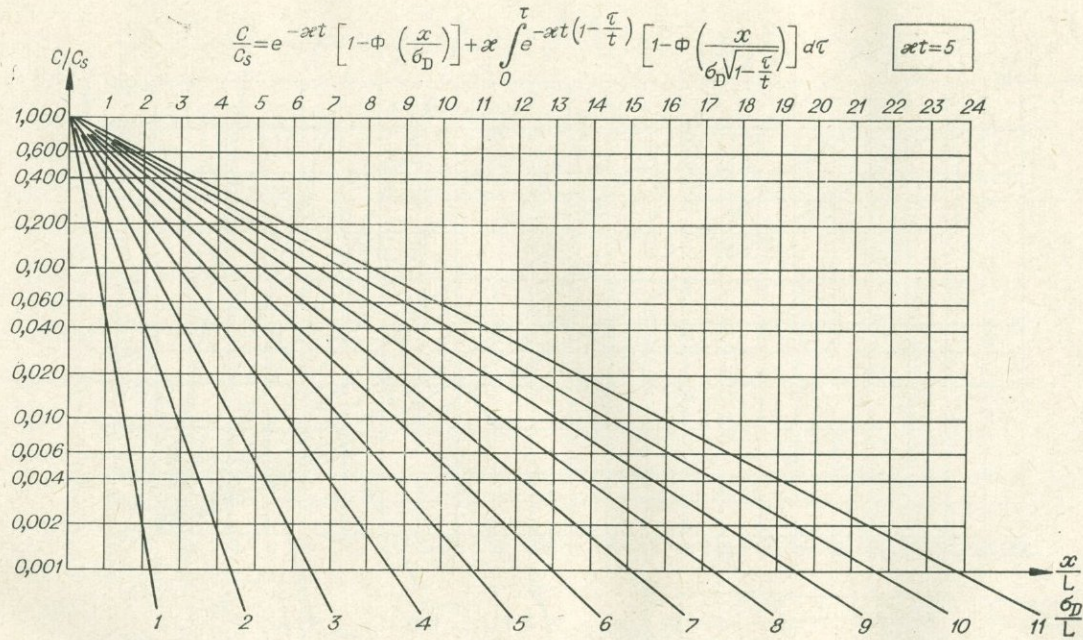
$$\frac{c}{c_s} = \frac{1}{t} \int_0^t \left[1 - \Phi\left(\frac{x}{\sigma_D}\right) \right] dt$$



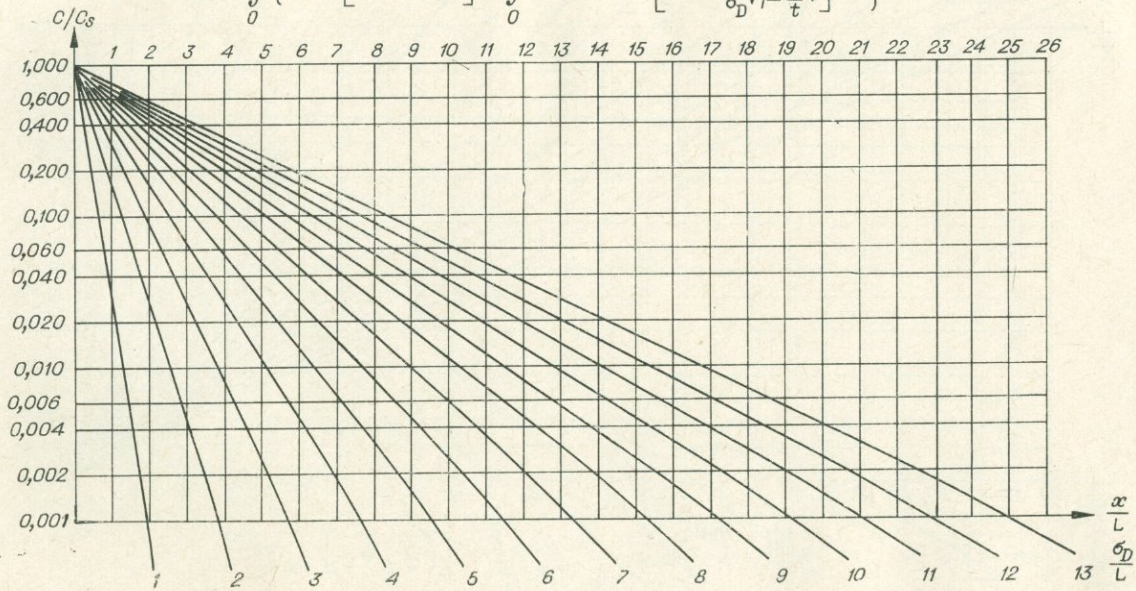


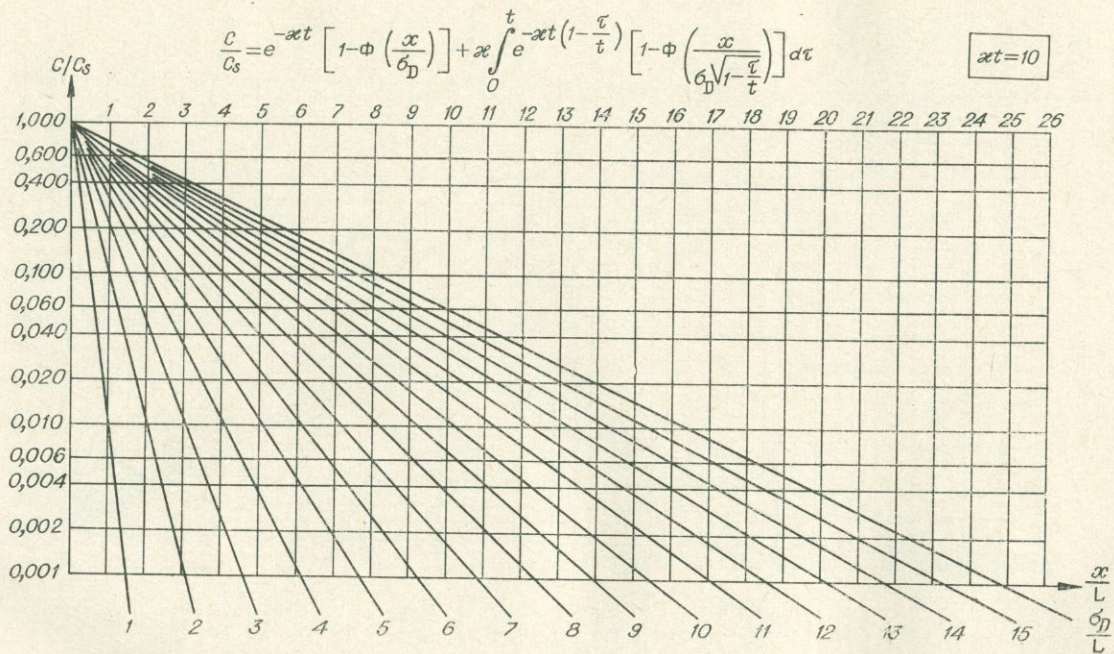
$$\frac{c}{c_s} = \frac{1}{T} \int_0^T \left\{ e^{-\alpha \tau} \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{\sigma_D} \right) \right] + \alpha \int_0^{\tau} e^{-\alpha t} \left(1 - \frac{\tau}{t} \right) \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{\sigma_D \sqrt{1 - \frac{\tau}{t}}} \right) \right] d\tau \right\} d\tau \quad \boxed{\alpha T = 1,0}$$

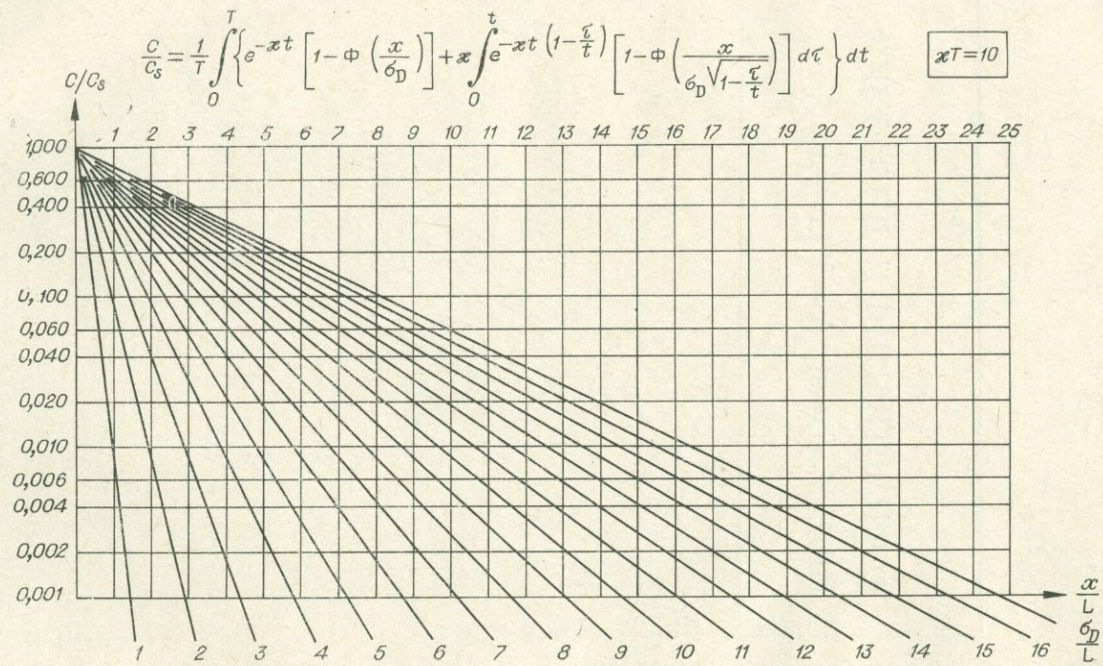




$$\frac{c}{c_s} = \frac{1}{T} \int_0^T \left\{ e^{-xt} \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{\sigma_D} \right) \right] + x \int_0^t e^{-xt} \left(1 - \frac{\tau}{t} \right) \left[1 - \Phi \left(\frac{x}{\sigma_D \sqrt{1 - \frac{\tau}{t}}} \right) \right] d\tau \right\} dt \quad \boxed{xT=5}$$

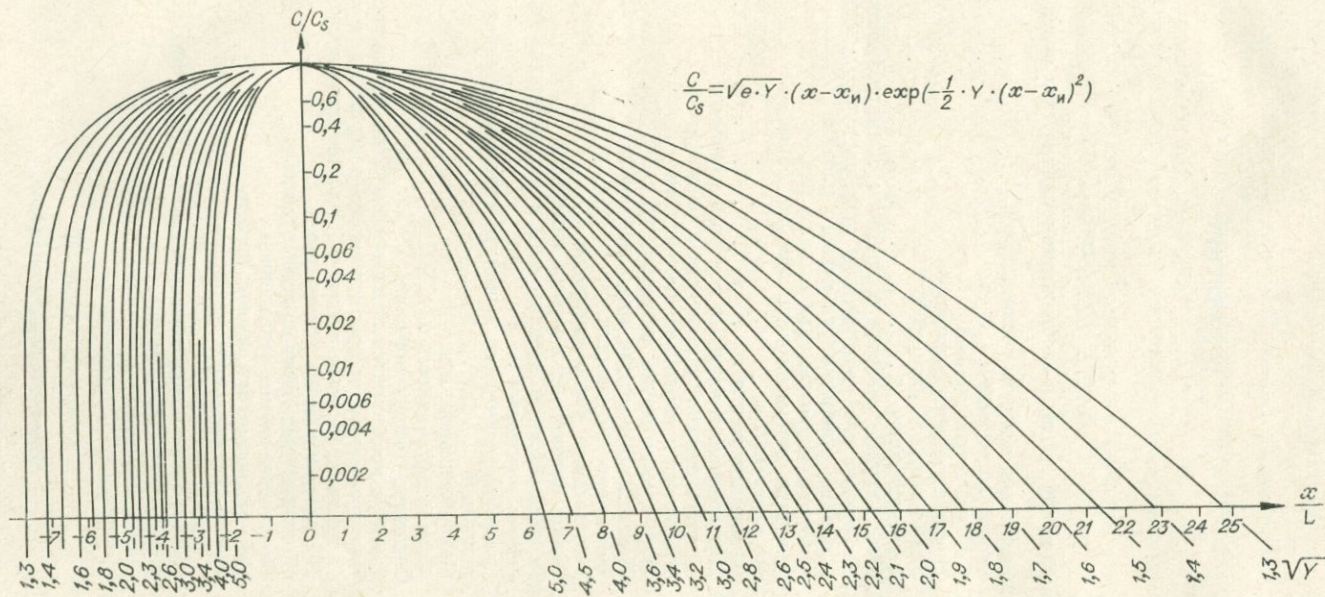






4. ФИЛЬТРАЦИЯ И ДИФФУЗИЯ

ПРИ $Y = \text{const}$, $A = Y(x - x_n)$



ОГЛАВЛЕНИЕ

| | |
|--------------------|---|
| Введение | 3 |
|--------------------|---|

ЧАСТЬ ПЕРВАЯ

Статистический анализ и изображение геохимических полей

| | | |
|------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Глава I. | Аппроксимация законов распределения | 7 |
| | § 1. Общие положения | 7 |
| | § 2. Статистические модели | 11 |
| | Нормальное распределение | — |
| | Логнормальное распределение | 14 |
| | g -распределение | 22 |
| | § 3. Используемые свойства и признаки симметризирующих функций | 33 |
| | § 4. Аппроксимация произвольных законов распределения | 44 |
| | Алгоритм аппроксимации первого ранга | 48 |
| | Алгоритм аппроксимации второго ранга | 50 |
| | Алгоритм аппроксимации третьего ранга | 59 |
| Глава II. | Ошибки измерений | 62 |
| | § 1. Общие положения | — |
| | § 2. Дисперсионный анализ и контроль измерений | 69 |
| | Систематические погрешности и расхождения | — |
| | Дисперсии и случайные погрешности | 75 |
| | Погрешности оценок погрешностей | 87 |
| | Искажения, вносимые дискретностью записей и группированием | 89 |
| | Порог чувствительности | 104 |
| | Необходимое число измерений | 105 |
| | § 3. Выбор оптимального метода измерений | 108 |
| Глава III. | Оценка распределений концентраций в геохимических полях | 112 |
| | § 1. Общие положения | — |
| | § 2. Связь статистического и пространственного распределений кон- центраций | 114 |
| | Макронеоднородности | 115 |
| | Микронеоднородности | 120 |
| | § 3. Смещение средних значений | 125 |
| | Влияние представительности проб и точности измерений | 125 |
| | Влияние формы пространственного распределения измеряемых величин. Решение задачи об «ураганных» пробах | 128 |
| | § 4. Изображение полей концентраций | 132 |
| | Принципы выделения полезных сигналов | — |
| | Подавление шумов усреднением | 135 |
| | Другие способы подавления шумов | 144 |
| | Выбор вертикального масштаба для графиков и сечения изо- линий для карт | — |
| | § 5. Изображение полей статистических характеристик | 148 |
| | Дисперсия и корреляция | — |
| | Перспективность | 152 |
| | § 6. Поправка на усреднение | 157 |

ЧАСТЬ ВТОРАЯ

Прямые и обратные задачи

| | | |
|-----------|-------------------------------------------------------|-----|
| Глава IV. | Решение прямых задач | 163 |
| | § 1. Исходные уравнения | — |
| | § 2. Фильтрационные аномалии | 167 |
| | Однородная среда | — |
| | Ступенчато-однородная среда | 171 |
| | Среда с переменным коэффициентом поглощения | 172 |
| | § 3. Диффузионные аномалии | 177 |

| | | |
|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| | Непоглощающая среда | 177 |
| | Поглощающая среда | 187 |
| | § 4. Общие свойства фильтрационных и диффузионных процессов | 190 |
| | § 5. Математическое моделирование сложных полей | 194 |
| | Палетки | 201 |
| | Композиционное моделирование | 210 |
| Глава V. | § 6. Перераспределение вещества по фракциям в рыхлом покрове | 213 |
| | Решение обратных задач (интерпретация геохимических полей) | — |
| | § 1. Общие положения | — |
| | Оценка начального пространственного распределения и процессов его преобразования | — |
| | Оценка геохимической подвижности элементов, размеров аномалий и времени их образования | 220 |
| | § 2. Упрощение интерпретации | 223 |
| | Ореолы, описываемые оператором с экспоненциальной функцией | 224 |
| | Ореолы, описываемые оператором с функцией Гаусса | 228 |
| | Аномалии других видов | 243 |
| | § 3. Комплексная интерпретация аномалий | 246 |
| Заключение | | 247 |
| Литература | | 248 |
| Приложение. | Атлас теоретических кривых C/C_s | 255 |
| | 1. Диффузионное рассеяние пластообразного тела при $D = \text{const}$, $\kappa = 0$ | 256 |
| | 2. Диффузионное рассеяние тела, занимающего полупространство, при $D = \text{const}$, $\kappa = 0$ | 264 |
| | 3. Диффузионное проникновение вещества в полупространство при $C_0 = \text{const}$, $D = \text{const}$, $\kappa = \text{const}$ | 266 |
| | 4. Фильтрация и диффузия при $Y = \text{const}$, $A = Y(x - x_0)$ | 274 |

РОПД ИЛЬИЧ ДУБОВ

КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
ГЕОХИМИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ
Для поисков рудных месторождений

Редактор *Н. В. Свобода*
Художник *Н. А. Пискун*
Художественный редактор *Э. С. Филонычева*
Технический редактор *Ф. Ф. Орлова*
Корректоры *И. С. Цитович, Н. В. Клопотная*

Сдано в набор 22 августа 1973 г. Подписано в печать
13 марта 1974 г. МН 00528. Бумага машиномелованная
70×108¹/₁₆. 17,5 печ. л., 24,5 усл. печ. л., 21,3 уч.-изд. л.
Заказ № 155. Тираж 1400 экз. Цена 2 р. 26 к.

Издательство «Наука», Сибирское отделение, 630099,
Новосибирск, 99, Советская, 18.
4-я типография издательства «Наука». 630077, Новоси-
бирск, 77, Станиславского, 25.



Замеченные опечатки

| Стр. | Строка | Напечатано | Следует читать |
|------|-----------------------|--------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|
| 35 | 17 сверху | $u(x)$ | $\overline{u(x)}$ |
| 47 | 9 сверху | $M(L_Q(q_{\Phi_1}^*,$ | $M(L_Q(q_1^*,$ |
| 47 | 10 сверху | $M(L)q_2^*, q_{\Phi}))$ | $M(L_Q)q_2^*, q_{\Phi}))$ |
| 67 | 17 снизу | $\sigma(\Delta \lg x)/ \Delta \lg(x) $ | $\sigma(\Delta \lg x)/ \overline{\Delta \lg(x)} $ |
| 103 | 23 сверху | $ \overline{\Delta} _{\text{ср}}/\lambda$ | $ \overline{\Delta}_d} _{\text{ср}}/\lambda$ |
| 155 | 1 снизу | ...функции при съемках... | ...функции Π_y^* при съемках... |
| 184 | 14 сверху | $\Delta t_i \rightarrow 0 \quad n \rightarrow \infty,$ | $\Delta t_i \rightarrow 0 \wedge n \rightarrow \infty,$ |
| 221 | 11 сверху | dV | dV' |
| 221 | 12, 15, 18, 21 сверху | V | V' |
| 240 | 10—11 сверху | разрешающаяся | разрешающая |
| 274 | 1 снизу | $(x - x_{II})$ | $(x - x_{II})$ |

Р. И. ДУБОВ. Количественные исследования геохимических полей для поисков рудных месторождений

**В СИБИРСКОМ ОТДЕЛЕНИИ ИЗДАТЕЛЬСТВА
«Н А У К А»**

ГОТОВЯТСЯ К ВЫПУСКУ СЛЕДУЮЩИЕ КНИГИ:

1. Процессы роста и синтеза полупроводниковых кристаллов и пленок, ч. I.
2. Процессы роста и синтеза полупроводниковых кристаллов и пленок, ч. II.
3. Вопросы молекулярной спектроскопии.
4. Логвиненко А. Т., Урываева Г. Д., Маслий Е. Н. Минералы цветных портландцементов.
5. Яворский И. А., Теробенин А. Н., Быков А. П. Улавливание аэрозолей в оловянной промышленности.
6. Логвиненко А. Т., Савинкина М. А. Физико-химические основы получения и твердения вяжущих материалов из рыхлых гипсовых руд.
7. Некоторые проблемы химии карбониевых ионов.

*Заказы направляйте по адресу: 630076, Новосибирск-76,
Красный проспект, 51, Магазин «Академкнига».*

5
Цена 2 р. 26 к.

1048